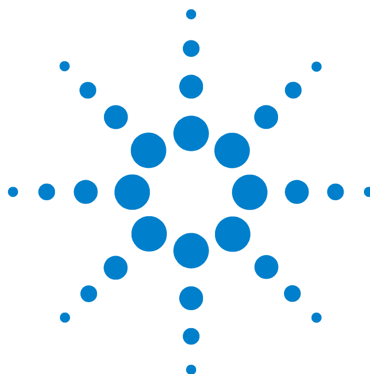


Agilent MassHunter 工作站软件

定量分析

入门指南



Agilent Technologies

声明

手册部件号

G3335-97108

版本

第一版， 2011 年 6 月

美国印刷

Agilent Technologies, Inc.
5301 Stevens Creek Blvd.
Santa Clara, CA USA 95051

软件修订版

本指南在被替换前适用于 Agilent MassHunter 工作站软件 - 定量分析程序的 B.05.xx 或更高版本。

如果您对本指南有任何建议，请发送电子邮件到 feedback_lcms@agilent.com。

担保

本文档包含的内容均按 “ 原版 ” 提供，若有更改，恕不另行通知。而且，在适用法律允许的最大范围内，Agilent 不对本手册及其所包含的信息做出任何明示或暗示的担保，其中包括但不限于对适销性和对具体用途适用性的暗示的担保。 Agilent 不对因提供、使用或执行本文档或其中所包含的信息而造成的任何错误或任何意外或附带的损失承担责任。如果 Agilent 与用户签有单独的书面协议，且协议中涉及本文档所含材料的担保条款与上述条款发生冲突，则该书面协议中的担保条款具有优先法律效力。

技术许可

本文档中所述的硬件和 / 或软件是依据许可提供的，且只能根据此类许可的条款进行使用或复制。

受限权利说明

美国政府受限权利。授予联邦政府的软件和技术数据权利仅包括通常提供给最终用户的那些权利。Agilent 根据 FAR 12.211（技术数据）和 12.212（计算机软件）和（对于国防部） DFARS 252.227-7015（技术数据 — 商品）以及 DFARS 227.7202-3（商业计算机软件或计算机软件文档中的权利）来提供软件和技术数据方面的此常规商业许可。

安全声明

小心

小心提示表示危险。提醒您注意某个操作步骤、某项操作或类似问题，如果执行不当或未遵照提示操作，可能会损坏产品或丢失重要数据。不要忽视**小心**提示，直到完全理解和符合所指出的条件。

警告

“ 警告 ” 提示表示危险。提醒您注意某个操作步骤、某项操作或类似问题，如果执行不当或未遵照提示操作，可能会导致人身伤害或死亡。除非已完全理解并符合所指出的条件，否则请不要忽视 “ 警告 ” 提示而继续进行操作。

内容提要 ...

《入门指南》提供步进练习，可帮助您学习使用定量分析程序。您可以使用系统附带的演示批处理 DrugsOfAbuse （练习 1 和 3 至 5）以及以 Verapamil 为目标的批处理 （练习 2）（位于安装磁盘的 **Data** 文件夹中）或您采集的数据进行这些练习。

DrugsOfAbuse 批处理包含从 Agilent 6410 三重四极杆 LC/MS 系统上采集的 MRM 数据文件。 Verapamil 批处理包含从 Agilent 6500 系列 Q-TOF LC/MS 系统上采集的 Q-TOF 数据文件。

1 设置和定量一批采集的 MRM 数据文件

在此练习中，您将使用采集的数据文件设置批处理表、定量方法以及目标化合物。最后，您将分析批处理并保存结果。本章适用于 Agilent 6410 三重四极杆 LC/MS 系统和 Agilent 7000A 三重四极杆 GC/MS 系统。

2 设置和定量一批采集的 Q-TOF 数据文件

在此练习中，您将使用采集的数据文件设置批处理表、定量方法以及目标化合物。最后，您将分析批处理并保存结果。

3 检查定量结果

在此练习中，您将检查批处理文件中的样品和化合物数据，自定义布局，并将批处理结果导出到 Microsoft Excel 文件。

4 使用工具评估结果

使用此练习中的工具可以更容易地评估定量结果并获得更准确的定量结果。

5 使用定量报告

在此练习中，您将使用指定的模板生成报告，然后在 Microsoft Excel 中检查这些报告。

选择正确的定量分析图标

在安装定量分析程序后，可在桌面上找到四个已安装的不同图标。在从这些图标启动定量分析程序时，系统将针对相应的仪器类型对缺省值和一些功能进行自定义。

在单击桌面上的定量分析图标时，将显示图标的全称。确保您选择的图标与您要分析的批处理中的数据类型一致。

开始进行这些练习之前

将名为 Data 的文件夹以解压缩格式从安装磁盘复制到硬盘上的任何位置。

该文件夹包含进行这些练习所需的所有数据文件。您可能需要首先对 zip 格式的数据文件进行解压缩。

不要重复使用系统中已存在的示例数据文件，除非您确信这些文件是从磁盘上的原始文件复制而来的，并且只有您使用过这些文件。如果系统上已有的示例数据文件与磁盘上的原始文件不完全一致，那么在这些练习过程中获得的结果将与本指南中显示的结果不一致。

目录

练习 1　设置和定量一批采集的 MRM 数据文件　9

任务 1. 设置新批处理　11
任务 2. 设置批处理的新方法　14
任务 3. 设置目标化合物　17
任务 4. 设置定量　20
任务 5. 设置积分器　26
任务 6. 分析和保存批处理　27

练习 2　设置和定量一批采集的 Q-TOF 数据文件　29

任务 1. 设置新批处理　31
任务 2. 设置批处理的新方法　34
任务 3. 设置目标化合物　37
任务 4. 设置定量　39
任务 5. 分析和保存批处理　42

练习 3　检查定量结果　43

任务 1. 浏览批处理表结果　44
任务 2. 更改结果窗口布局　50
任务 3. 导出和打印结果　57

练习 4　使用三个工具评估结果　59

任务 1. 调整校准曲线拟合　60
任务 2. 进行无参数积分　63
任务 3. 检测离群值　77

练习 5　生成定量报告　83

参考　89

十大主要功能　90

定量方法 94
无参数积分器 95
批处理概览：结果 97
化合物概览 98
化合物确认 100
化合物校准 101

练习 1
设置和定量一批采集的 MRM 数据文件

任务 1. 设置新批处理 11
任务 2. 设置批处理的新方法 14
任务 3. 设置目标化合物 17
任务 4. 设置定量 20
任务 5. 设置积分器 26
任务 6. 分析和保存批处理 27

在本练习中，您将为一批采集的数据文件设置定量方法。您将通过安装磁盘上的 **DrugsOfAbuse** 数据文件进行该练习，并了解如何执行下列任务：

- 设置批处理表，其中包含用于滥用药物的未知样品和校准数据文件：安非他明、可卡因、甲基苯丙胺和 MDMA。
- 根据最高浓度样品的校准标准设置新定量方法。
- 设置目标化合物。
  - 查看数据文件中化合物的 MRM 转化和色谱图参数。
  - 设置每个化合物的内标。
- 设置方法的定量步骤。
  - 输入具有最高浓度的化合物校准标准的浓度和稀释模式。
  - 设置定性离子和校准曲线。
- 自动定量批处理并保存结果。



我们将每一个练习的内容都放在了一个表中，每个表中分别包含以下三列：

- 步骤 — 通过这些常规说明自学使用此程序。
- 详细说明 — 如果您需要帮助或更喜欢使用步进学习方式，则可使用这些说明。
- 注释 — 阅读这些注释可了解有关练习中的每个步骤的提示和其他信息。

开始操作之前 ...

确保将 **DrugsOfAbuse** 文件夹从安装磁盘上的 **Data** 文件夹复制到您系统上的文件夹。

任务 1. 设置新批处理

在此任务中，您将设置一个批处理表，该批处理包含三个未知样品的数据文件以及几个滥用药物的校准样品：安非他明、可卡因、甲基苯丙胺和 MDMA。

步骤	详细说明	注释
1 创建新批处理以保留样品。 • 从 **DrugsOfAbuse** 文件夹选择所有数据文件。 • 将批处理文件命名为 ***iii*_test_01**，其中字母 “*iii*” 表示您的姓名首字母。	**a** 要启动定量分析程序，请单击桌面上的 **QuantitativeAnalysis (QQQ)** 图标 。 如果是首次使用该程序，则会显示缺省布局，如图 1 所示。	• 也可以通过单击 “ 开始 ” 菜单中的 **程序 > Agilent > MassHunter 工作站 > 定量分析 (QQQ)** 来访问该程序。 • 在处理 QQQ 数据时可使用不同功能。

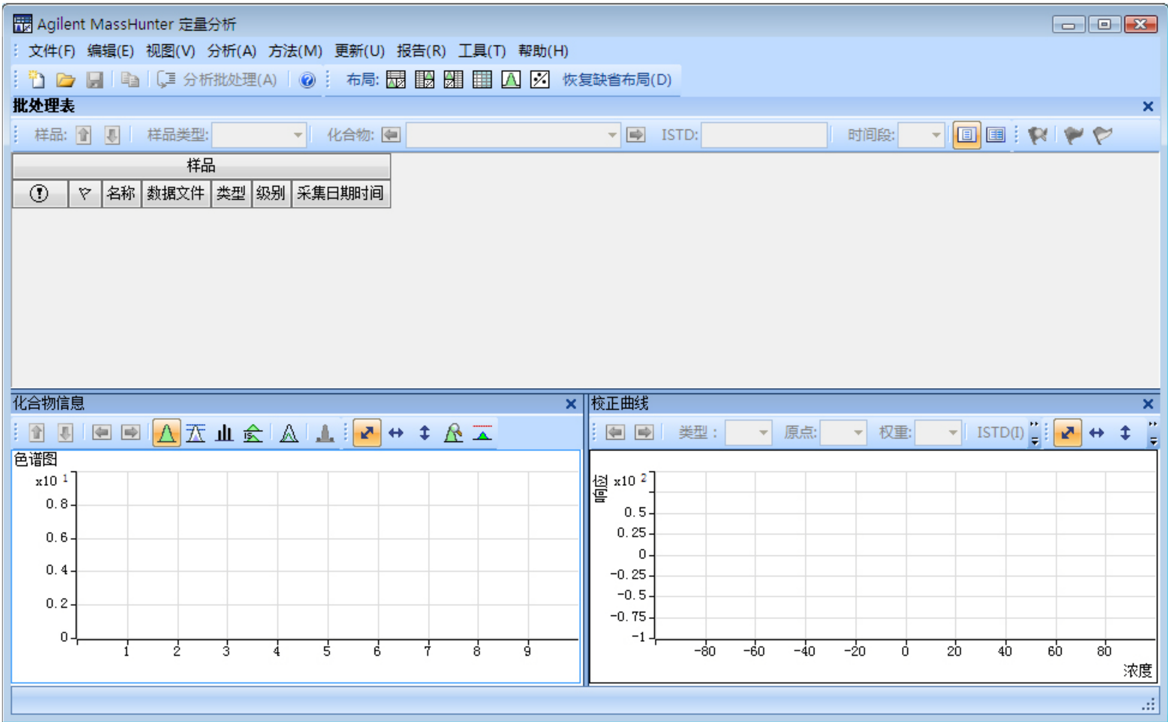


图 1 缺省布局

步骤	详细说明	注释
	b 单击**文件 > 新建批处理**。系统将打开**新建批处理**对话框。 **c** 浏览至文件夹 \ ***您的文件夹*** **\DrugsOfAbuse**。 **d** 输入批处理文件名 ***iii*_Test_01**，然后单击**打开**。	• 如果未显示缺省布局，请单击工具栏中的**恢复缺省布局**，然后再创建新批处理。 恢复缺省布局(D)
2 将 **DrugsOfAbuse** 文件夹中的所有样品添加到批处理。	**a** 单击**文件 > 添加样品**：系统将显示**添加样品**对话框。 **b** 单击**全选**选择所有样品，然后单击**确定**将这些样品添加到批处理。 **批处理表**不再是空的。现在它包含校准、QC 和未知样品。请参见图 2。	• 请注意，只有三个文件是未知样品，一个是空白，五个是不同校准级别的校准文件，另外两个是 QC 样品。



步骤	详细说明	注释

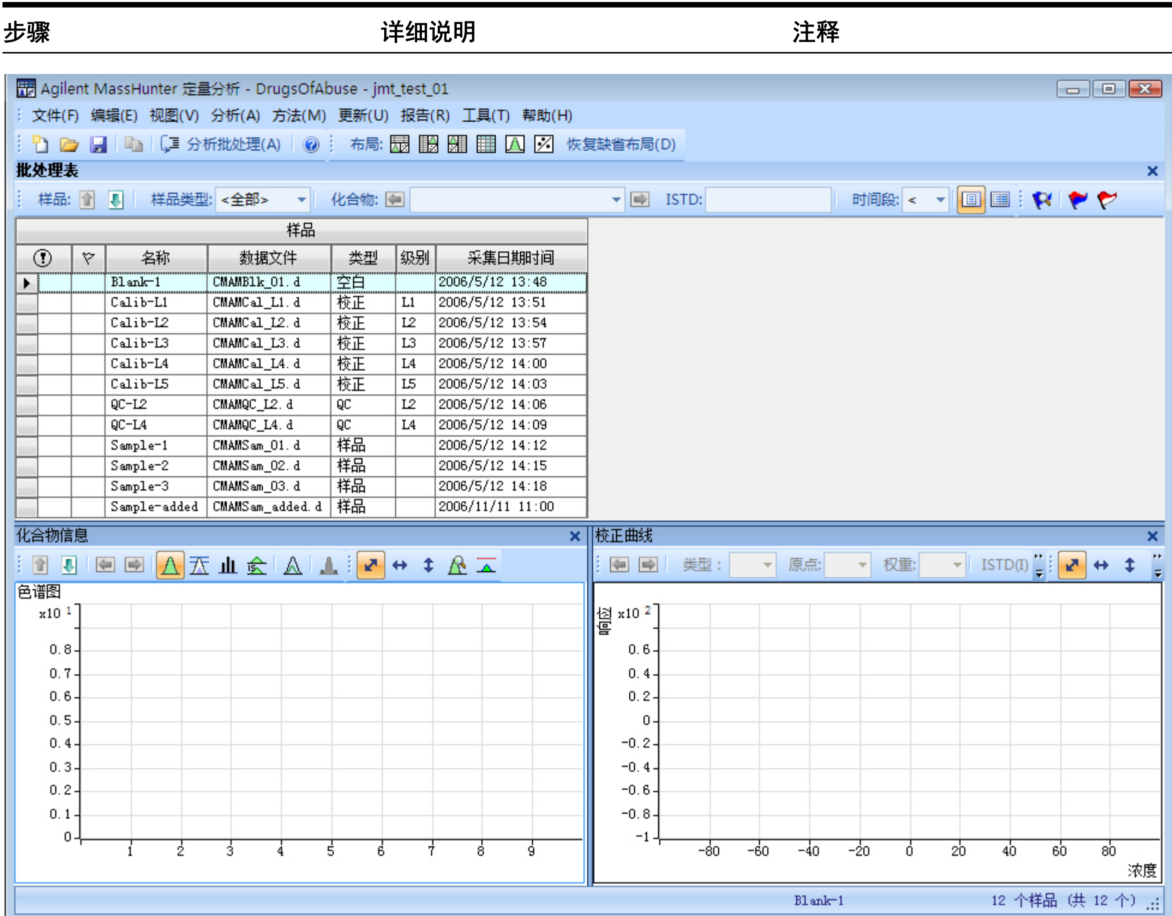


图 2　　在定量以前的包含滥用药物样品的批处理表

任务 2. 设置批处理的新方法

此任务说明如何根据具有最高浓度的化合物的样品的校准数据文件设置新定量方法。

步骤	详细说明	注释
1 从采集的 MRM 数据创建新方法。 • 使用具有最高信号的校准数据文件。	**a** 使用光标高亮显示具有最高浓度的化合物级别的校准标准，如下图所示。	• 使用具有化合物的强信号的样品，如高浓度校准样品，让程序创建具有适当的保留时间和定性离子比的方法。



名称	数据文件	类型	级别	采集日期时间
Blank-1	CMAMBlk_01.d	空白		2006/5/12 13:48
Calib-L1	CMAMCal_L1.d	校正	L1	2006/5/12 13:51
Calib-L2	CMAMCal_L2.d	校正	L2	2006/5/12 13:54
Calib-L3	CMAMCal_L3.d	校正	L3	2006/5/12 13:57
Calib-L4	CMAMCal_L4.d	校正	L4	2006/5/12 14:00
Calib-L5	CMAMCal_L5.d	校正	L5	2006/5/12 14:03
QC-L2	CMAMQC_L2.d	QC	L2	2006/5/12 14:06
QC-L4	CMAMQC_L4.d	QC	L4	2006/5/12 14:09
Sample-1	CMAMSam_01.d	样品		2006/5/12 14:12
Sample-2	CMAMSam_02.d	样品		2006/5/12 14:15
Sample-3	CMAMSam_03.d	样品		2006/5/12 14:18
Sample-added	CMAMSam_added.d	样品		2006/11/11 11:00

步骤	详细说明	注释
	b 单击**方法 > 编辑**切换到方法编辑模式。 **方法任务**显示在视图左侧的列中，如图 3 所示。	• 请注意，图 3 显示方法编辑的缺省布局。 • 如果未显示缺省布局，请单击工具栏中的**恢复缺省布局**，然后在下一步创建新方法。 恢复缺省布局(D)

步骤	详细说明	注释

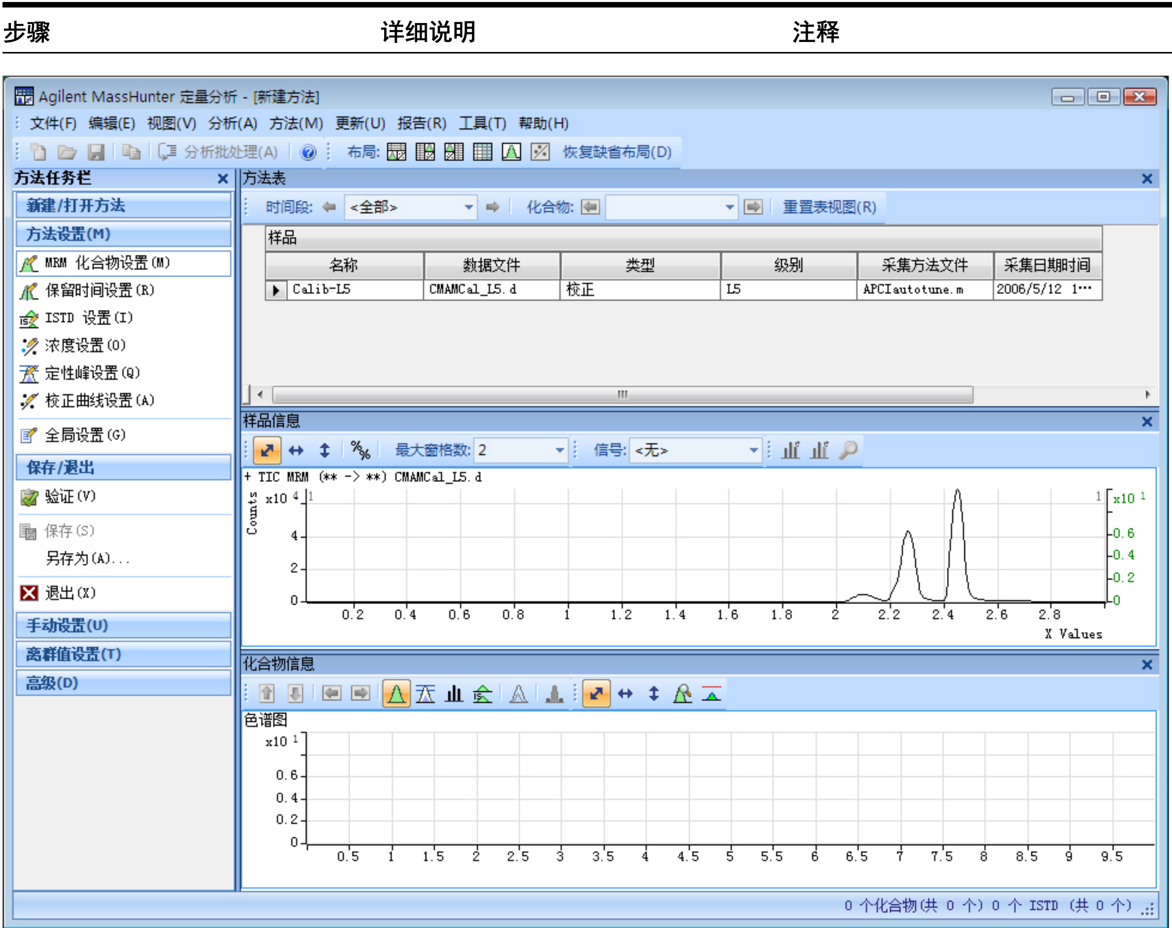


图 3　　方法编辑模式

步骤	详细说明	注释
	c 在方法表左侧的侧栏中的**方法任务**下方，单击**新建 / 打开方法 > 根据所采集的数据新建方法**。选择否以将方法应用于批处理。 系统将显示**请选择样品文件夹 ...** 对话框。 **d** 单击 **CMAMCal_L5.d** 并单击**打开**，以导入采集方法信息。	• 也可以单击**方法 > 新建 > 从采集的 MRM 数据**新建方法。 • 下图显示级别为 5 的校准标准的缺省布局。

任务 3. 设置目标化合物

通过此任务，您可以学习检查新定量方法的 MRM 转化以及保留时间数据，并针对单个目标化合物进行更改。还可以学习为每个目标化合物设置 ISTD 化合物。

步骤	详细说明	注释
1 检查从导入的采集方法创建的新定量方法的 MRM 转化情况。	a 在**方法表**窗口左侧的侧栏中的**方法任务**下方，单击**方法设置任务 > MRM 化合物设置**。	• 与 MRM 转化关联的化合物名称将输入到采集方法中。缺省情况下，选择最大信号作为定量离子。

Agilent MassHunter 定量分析 - [新建方法]

文件(F) 编辑(E) 视图(V) 分析(A) 方法(M) 更新(U) 报告(R) 工具(T) 帮助(H)

分析批处理(A) 布局: 恢复缺省布局(D)

方法任务栏

新建/打开方法
方法设置(M)
MRM 化合物设置(M)
保留时间设置(R)
ISTD 设置(I)
浓度设置(O)
定性峰设置(Q)
校正曲线设置(A)
全局设置(G)
保存/退出
验证(V)
保存(S)
另存为(A)...
退出(X)
手动设置(U)
离群值设置(T)
高级(D)

方法表

时间段: <全部> 化合物: Meth-d5 重置表视图(R)

级别名称前缀: 级别数: 10 创建级别(C)

样品

名称	数据文件	类型	级别	采集方法文件	采集日期时间
Calib-L5	CMAMCal_L5.d	校正	L5	APCIautotune.m	2006/5/12 1…

定量化合物

名称	TS	转换	全扫描	类型	前级离子	产物离子
Amp	1	136.2 -> 91.4	MRM	目标	136.2	
Amp-d5	1	141.1 -> 93.4	MRM	ISTD	141.1	
Cocaine	1	304.1 -> 182.0	MRM	目标	304.1	
Cocaine-d3	1	307.1 -> 185.0	MRM	ISTD	307.1	
MDMA	1	194.2 -> 163.3	MRM	目标	194.2	
MDMA-d5	1	199.2 -> 164.3	MRM	ISTD	199.2	
Meth	1	150.1 -> 119.3	MRM	目标	150.1	
Meth-d5	1	155.2 -> 92.3	MRM	ISTD	155.2	

步骤	详细说明	注释
	b 要检查导入的保留时间数据，请单击**方法设置 > 保留时间设置**。	• 您可以修改单个化合物的蓝色数据字段。
2 设置 ISTD 化合物。 • 将相应的含重氢的化合物指定为每个目标化合物的内标 (ISTD)。	**a** 单击**方法设置任务 > ISTD 设置**。 **b** 对于每个目标化合物行，单击 **ISTD 化合物名称**单元格中的向下箭头。	• 不要尝试将 ISTD 名称输入到 ISTD 化合物行中。

步骤	详细说明	注释
	c 单击与目标化合物关联的 ISTD 名称。 **d** 输入每个 ISTD 化合物的 ISTD 浓度（**ISTD 浓度**）。	

Agilent MassHunter 定量分析 - [新建方法]

文件(F) 编辑(E) 视图(V) 分析(A) 方法(M) 更新(U) 报告(R) 工具(T) 帮助(H)

分析批处理(A) 布局: 恢复缺省布局(D)

方法任务栏：新建/打开方法；方法设置(M)；MRM 化合物设置(M)；保留时间设置(R)；ISTD 设置(I)；浓度设置(O)；定性峰设置(Q)；校正曲线设置(A)；全局设置(G)；保存/退出；手动设置(U)；离群值设置(T)；高级(D)

方法表

时间段: <全部> 化合物: Amp 重置表视图(R)

级别名称前缀: 级别数: 10 创建级别(C)

样品

名称	数据文件	类型	级别	采集方法文件	采集日期时间
Calib-L5	CMAMCal_L5.d	校正	L5	APCIautotune.m	2006/5/12 1…

定量化合物

名称	TS	转换	全扫描	类型	ISTD 化合物名称	ISTD 标记	ISTD 浓度	时间参比标记
Amp	1	136.2 -> 91.4	MRM	目标	Amp-d5	☐		☐
Amp-d5	1	141.1 -> 93.4	MRM	ISTD	<无>	☑	50.0000	☐
Cocaine	1	304.1 -> 182.0	MRM	目标	Cocaine-d3	☐		☐
Cocaine-d3	1	307.1 -> 185.0	MRM	ISTD	<无>	☑	50.0000	☐
MDMA	1	194.2 -> 163.3	MRM	目标	MDMA-d5	☐		☐
MDMA-d5	1	199.2 -> 164.3	MRM	ISTD	<无>	☑	50.0000	☐
Meth	1	150.1 -> 119.3	MRM	目标	Meth-d5	☐		☐
Meth-d5	1	155.2 -> 92.3	MRM	ISTD	<无>	☑	50.0000	☐

4 个化合物(共 4 个) 4 个 ISTD (共 4 个)

任务 4. 设置定量

此任务说明如何为方法的下列数据设置定量参数：

- 校准级别
- 定性离子
- 校准曲线拟合

步骤	详细说明	注释
1 为每个化合物创建五个校准级别。 • 将安非他明的具有最高浓度的化合物设置为 125。 • 将安非他明的稀释模式设置为 1:5:2:2.5:2。 • 比较该稀释模式下五个级别的浓度。	**a** 单击**方法设置任务 > 浓度设置**，然后在安非他明 (Amp) 的**稀释高浓度**列中输入 `125`。 **b** 在安非他明的**稀释模式**列中输入 `1:5:2:2.5:2`。 **c** 确保**系列稀释**工具栏中的**级别名称前缀是 L**，**级别数是 5**。	

Agilent MassHunter 定量分析 - [新建方法]

文件(F) 编辑(E) 视图(V) 分析(A) 方法(M) 更新(U) 报告(R) 工具(T) 帮助(H)

分析批处理(A) 布局: 恢复缺省布局(D)

方法任务栏：新建/打开方法；方法设置(M)；MRM 化合物设置(M)；保留时间设置(R)；ISTD 设置(I)；浓度设置(O)；定性峰设置(Q)；校正曲线设置(A)；全局设置(G)；保存/退出；手动设置(U)；离群值设置(T)；高级(D)

方法表

时间段: <全部> 化合物: MDMA 重置表视图(R)

级别名称前缀: L 级别数: 5 创建级别(C)

样品

名称	数据文件	类型	级别	采集方法文件	采集日期时间
Calib-L5	CMAMCal_L5.d	校正	L5	APCIautotune.m	2006/5/12 1…

定量化合物

名称	TS	转换	全扫描	类型	稀释高浓度	稀释模式	单位
Amp	1	136.2 -> 91.4	MRM	目标	125.0000	1:5:2:2.5:2	ng/ml
Amp-d5	1	141.1 -> 93.4	MRM	ISTD			ng/ml
Cocaine	1	304.1 -> 182.0	MRM	目标			ng/ml
Cocaine-d3	1	307.1 -> 185.0	MRM	ISTD			ng/ml
MDMA	1	194.2 -> 163.3	MRM	目标			ng/ml
MDMA-d5	1	199.2 -> 164.3	MRM	ISTD			ng/ml
Meth	1	150.1 -> 119.3	MRM	目标			ng/ml
Meth-d5	1	155.2 -> 92.3	MRM	ISTD			ng/ml

4 个化合物(共 4 个) 4 个 ISTD (共 4 个)

图 4 为第一个化合物创建五个校准级别

步骤	详细说明	注释
	d 单击**创建级别**。 **e** 比较稀释高浓度和稀释模式下新创建的校准级别的浓度。	• 为安非他明创建了校准表后，可指示程序将该表复制到步骤 2 中的其他目标化合物。



步骤	详细说明	注释
2 将校准级别和浓度复制到其他化合物。 • 关闭**化合物信息**窗口。 • 比较四个化合物的校准设置。	**a** 单击**方法 > 将校准级别复制到 ...**。系统将显示**将校准级别复制到**对话框。 **b** 单击**全选**，然后单击**确定**。	



步骤	详细说明	注释
	c 关闭定量数据分析主视图下半部分中的**化合物信息**窗口和**样品信息**窗口。 **d** 浏览**方法表**，比较四个目标化合物（即安非他明、可卡因、甲基苯丙胺和 MDMA）的校准浓度设置。	

方法表

时间段: <全部> 化合物: Meth 重置表视图(R)

级别名称前缀: L 级别数: 5 创建级别(C)

样品

名称	数据文件	类型	级别	采集方法文件	采集日期时间
Calib-L5	CMAMCal_L5.d	校正	L5	APCIautotune.m	2006/5/12 1…

定量化合物

名称	TS	转换	全扫描	类型	稀释高浓度	稀释模式	单位
Amp	1	136.2 -> 91.4	MRM	目标	125.0000	1:5:2:2.5:2	ng/ml

校正

级别	浓度
L1	2.5000
L2	5.0000
L3	12.5000
L4	25.0000
L5	125.0000

定量化合物

名称	TS	转换	全扫描	类型	稀释高浓度	稀释模式	单位
Amp-d5	1	141.1 -> 93.4	MRM	ISTD			ng/ml
Cocaine	1	304.1 -> 182.0	MRM	目标	125.0000	1:5:2:2.5:2	ng/ml

校正

级别	浓度
L1	2.5000
L2	5.0000
L3	12.5000
L4	25.0000
L5	125.0000

定量化合物

名称	TS	转换	全扫描	类型	稀释高浓度	稀释模式	单位
Cocaine-d3	1	307.1 -> 185.0	MRM	ISTD			ng/ml
MDMA	1	194.2 -> 163.3	MRM	目标	125.0000	1:5:2:2.5:2	ng/ml

校正

级别	浓度
L1	2.5000
L2	5.0000
L3	12.5000
L4	25.0000
L5	125.0000

步骤	详细说明	注释
3 设置定性离子和校准曲线。 • 检查定性峰设置参数。 • 将缺省曲线原点从 “ 线性 ” 更改为 “ 强制 ”。	**a** 单击**方法设置 > 定性峰设置**，然后检查定性峰设置参数。	• 当系统导入 MRM 采集信息时，将自动填充定性峰设置参数。 • 在创建方法的过程中，除了化合物的定量离子外，还将其他 MRM 转化指定为定性离子。



步骤	详细说明	注释
	b 单击**方法设置 > 校准曲线设置**。 **c** 对于每个目标化合物，将 **CF 原点**更改为**强制**。	

步骤	详细说明	注释
4 验证并保存方法。	a 单击**保存 / 退出 > 验证**，验证方法设置。 Agilent MassHunter 定量分析 方法已验证。没有发现错误或警告。 确定 b 在显示验证消息后，单击**确定**。 c 单击**保存 / 退出 > 退出**，然后在显示**是否要将此方法应用于批处理？**提示时单击**是**。	• 您可以在屏幕底部查看发生的任何验证错误。

任务 5. 设置积分器

步骤	详细说明	注释
1 将缺省积分器更改为 MS-MS。	a 单击**方法 > 编辑**或按 **F10**。 b 单击**方法 > 高级任务**。 c 在**高级任务**下的方法任务工具栏中，选择**积分参数设置**。 d 在方法表中，单击位于 **积分器**值右侧的框。	

样品

名称	数据文件	类型	级别	采集方…
Calib-L5	CMAMCal_L5.d	校正	L5	APCIauto…

定量化合物

名称	TS	转换	全扫描	类型	稀释高浓度	稀释…
Amp	1	136.2 -> 91.4	MRM	目标	125.0000	1:5:2:2.5:2…

校正

级别	浓度
L1	2.5000
L2	5.0000
L3	12.5000
L4	25.0000
L5	125.0000

定量化合物

名称	TS	转换	全扫描	类型	稀释高浓度	稀释…
Amp-d5	1	141.1 -> 93.4	MRM	ISTD		
Cocaine	1	304.1 -> 182.0	MRM	目标	125.0000	1:5:2:2.5:2…

校正

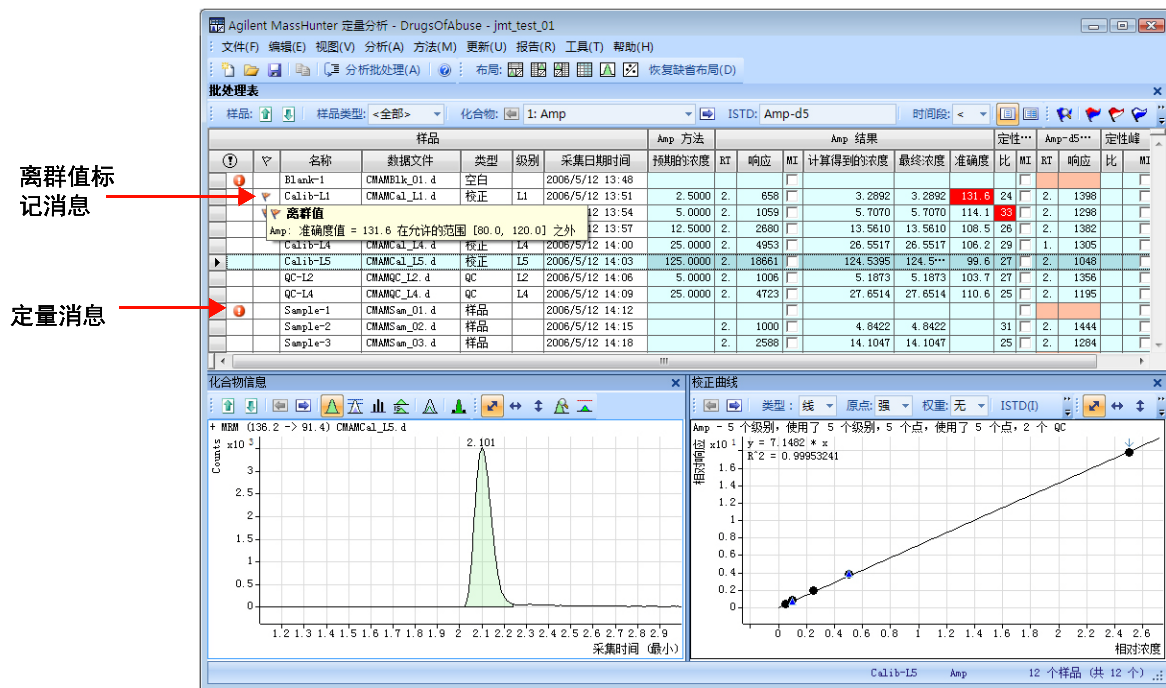
级别	浓度
L1	2.5000
L2	5.0000
L3	12.5000
L4	25.0000
L5	125.0000

e 在**积分**窗口中，从下拉菜单中选择 **MS-MS**。
f 单击**全部适用**。
g 单击**确定**。
h 单击**保存 / 退出 > 退出**，然后在显示**是否要将此方法应用于批处理？**提示时单击**是**。

任务 6. 分析和保存批处理

在本练习中，您将自动定量批处理，然后保存结果。

步骤	详细说明	注释
1 分析批处理，检查每个化合物的结果。 • 检查定量消息，它将显示没有定量信号的样品。 • 检查离群值标记消息。	**a** 单击工具栏中的**分析批处理**图标 分析批处理(A) 开始批处理分析。 **b** 使光标经过样品 1 的定量消息。 **c** 使光标经过前两个校准标准的标记。	• 请注意，程序在样品 -1 中未找到安非他明 (Amp) 的数据。 • 请注意，两个校准标准包含离群值数据。



2 保存批处理。	**a** 单击**文件 > 保存批处理**。 **b** 单击**文件 > 关闭批处理**以关闭批处理。	

练习 2
设置和定量一批采集的 Q-TOF 数据文件

任务 1. 设置新批处理 31
任务 2. 设置批处理的新方法 34
任务 3. 设置目标化合物 37
任务 4. 设置定量 39
任务 5. 分析和保存批处理 42

在本练习中，您将为一批采集的 Q-TOF 数据文件设置定量方法。您将通过安装磁盘上的 **Verapamil** 数据文件进行该练习，并了解如何执行下列任务：

- 设置一个批处理表，其中包含戊脉安的空白和校准数据文件。
- 根据最高浓度样品的校准标准设置新定量方法。
- 设置目标化合物。
  - 查看数据文件中戊脉安化合物的产物离子和色谱图参数。
- 设置方法的定量步骤。
  - 输入具有最高浓度的化合物校准标准的浓度和稀释模式。
  - 设置定性离子和校准曲线。
- 自动定量批处理并保存结果。



我们将每一个练习的内容都放在了一个表中，每个表中分别包含以下三列：

- 步骤 – 通过这些常规说明自学使用此程序。
- 详细说明 – 如果您需要帮助或更喜欢使用步进学习方式，则可使用这些说明。
- 注释 – 阅读这些注释可了解有关练习中的每个步骤的提示和其他信息。

开始操作之前 ...

确保将 **Verapamil-targetedMSMS** 文件夹从安装磁盘上的 **Data/QTOF** 文件夹复制到您系统上的文件夹。

任务 1. 设置新批处理

在此任务中，您将设置一个批处理表，其中包含戊脉安的校准样品的数据文件。本部分中的许多任务与练习 1 中的任务相同。

步骤	详细说明	注释
1 创建新批处理以保留样品。 • 从 **Verapamil-targetedMSMS** 文件夹选择所有数据文件。 • 将批处理文件命名为 ***iii*_test_01**，其中字母 "*iii*" 表示您的姓名首字母。	**a** 要启动定量分析程序，请单击桌面上的 **QuantitativeAnalysis (Q-TOF)** 图标 。如果是首次使用该程序，则会显示缺省布局，如图 5 所示。	• 也可以通过单击 " 开始 " 菜单中的程序 **> Agilent > MassHunter Workstation > Quantitative Analysis (Q-TOF)** 来访问该程序。

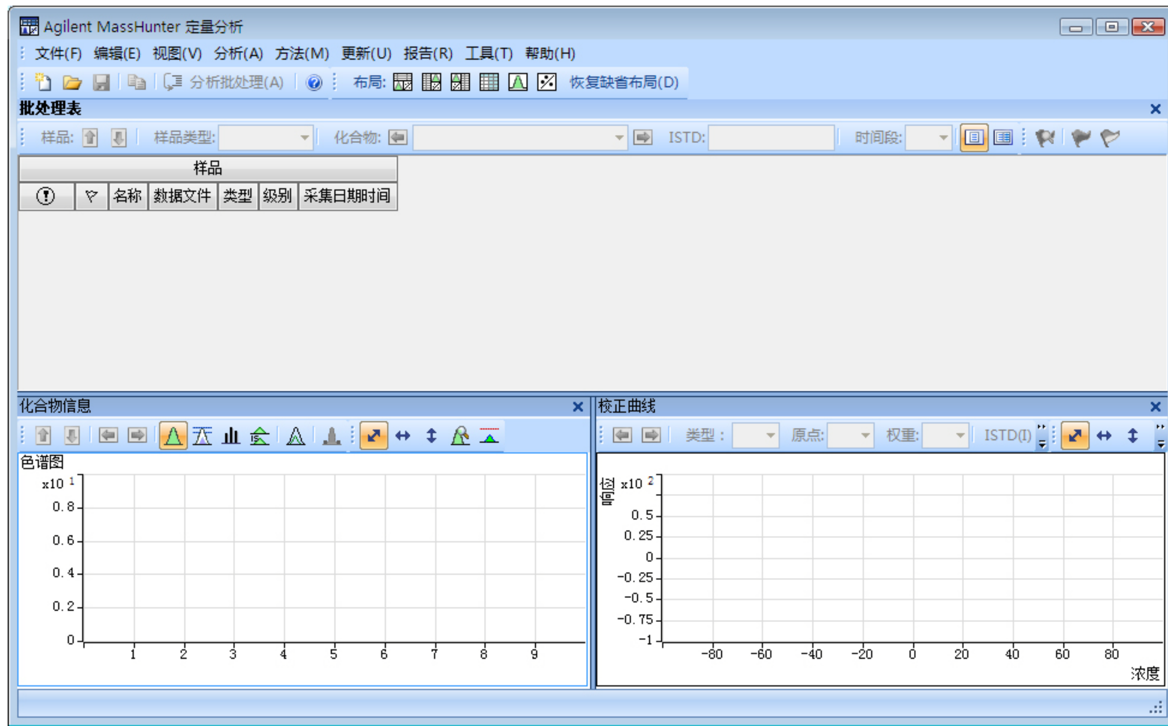
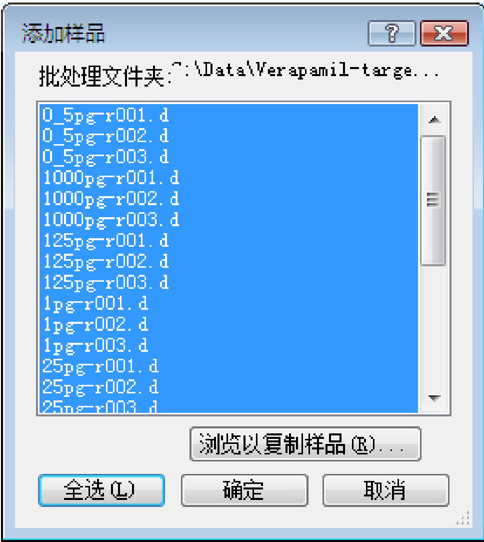


图 5 缺省布局

步骤	详细说明	注释
	b 单击**文件** > **新建批处理**。系统将打开**新建批处理**对话框。 **c** 浏览至文件夹 \ ***您的目录*** **\Verapamil-targetedMSMS**。 **d** 输入批处理文件名 ***iii*_Test_01**，然后单击**打开**。	• 如果未显示缺省布局，请单击工具栏中的**恢复缺省布局**，然后再创建新批处理。 恢复缺省布局(D)
2 将 **Verapamil** 文件夹中的所有样品添加到批处理。	**a** 单击**文件** > **添加样品**： 系统将显示**添加样品**对话框。 **b** 单击**全选**选择所有样品，然后单击**确定**将这些样品添加到批处理。 **批处理表**不再是空的。现在它包含校准和空白样品。请参见图 6。	• 请注意，五个文件是空的，其他文件是不同校准级别的所有校准文件。



步骤	详细说明	注释

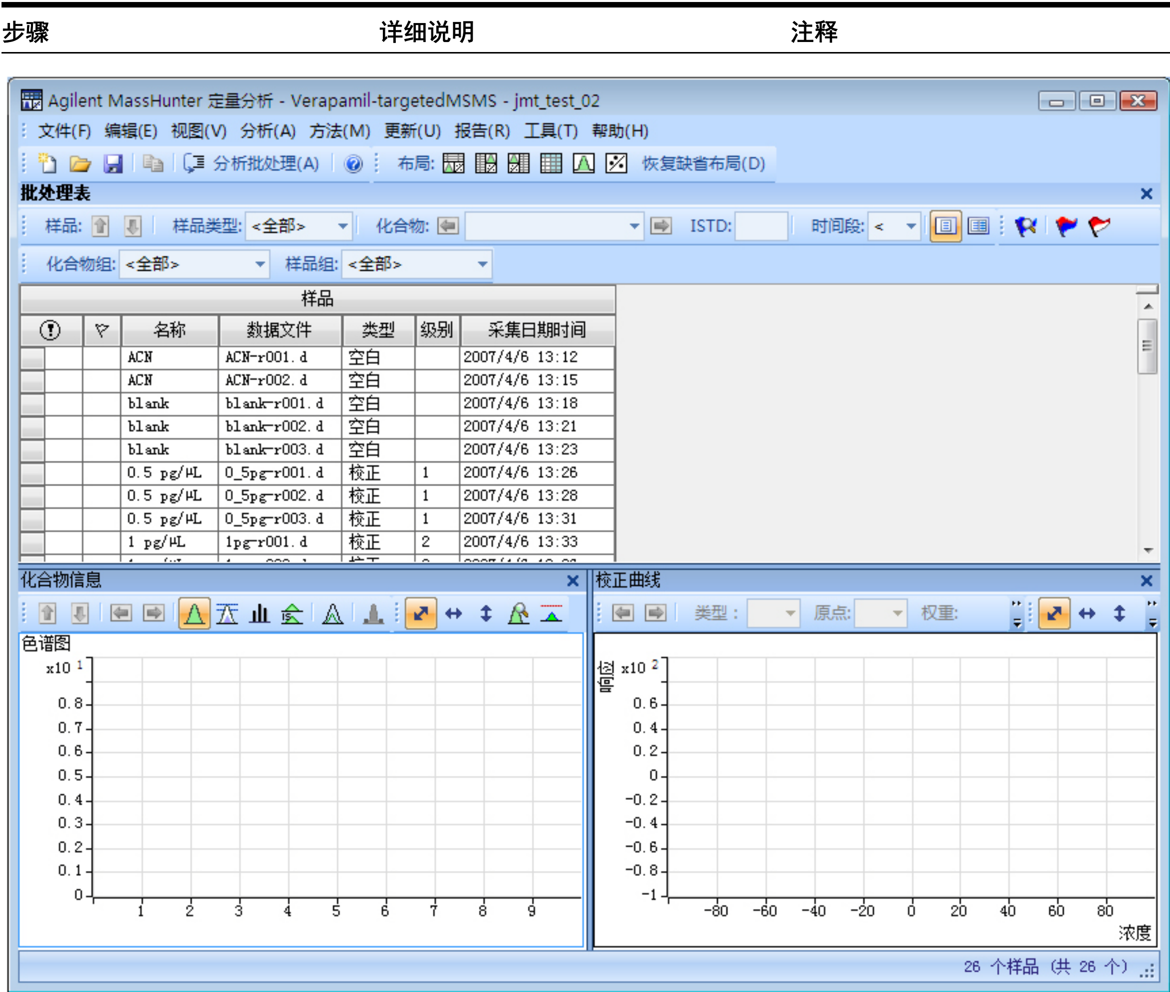


图 6　　定量之前的包含戊脉安样品的批处理表

任务 2. 设置批处理的新方法

此任务说明如何根据具有最高浓度的化合物的样品的校准数据文件设置新定量方法。

步骤	详细说明	注释
1 从采集的 Q-TOF 数据创建新方法。 • 使用具有最高信号的校准数据文件。	**a** 使用光标高亮显示具有最高浓度的化合物级别的校准标准，如下图所示。	• 使用具有化合物的强信号的样品，如高浓度校准样品，让程序创建具有适当的保留时间和定性离子比的方法。

Agilent MassHunter 定量分析 - Verapamil-targetedMSMS - jmt_test_02

文件(F) 编辑(E) 视图(V) 分析(A) 方法(M) 更新(U) 报告(R) 工具(T) 帮

分析批处理(A) 布局:

批处理表

样品: 样品类型: <全部> 化合物:

化合物组: <全部> 样品组: <全部>

样品

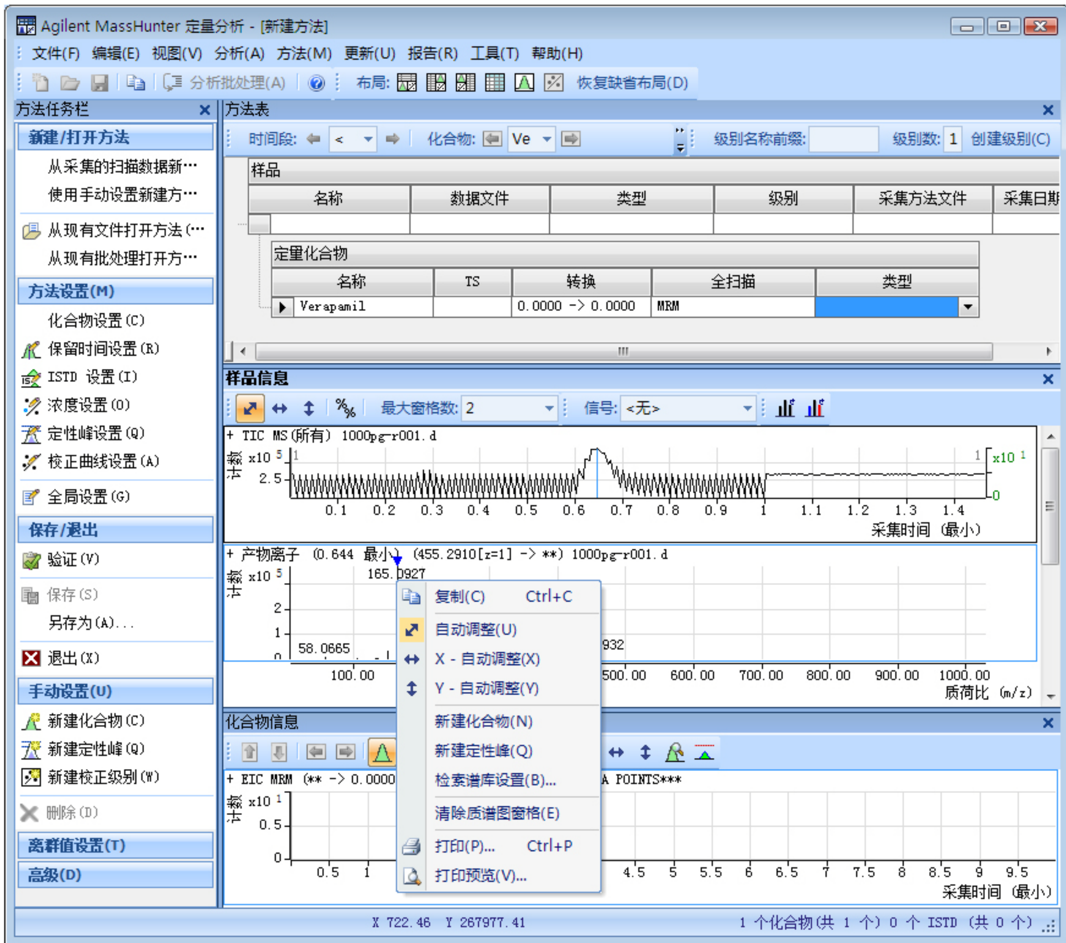
名称	数据文件	类型	级别	采集日期时间
125 pg/μL	125pg-r001.d	校正	5	2007/4/6 13:56
125 pg/μL	125pg-r002.d	校正	5	2007/4/6 13:58
125 pg/μL	125pg-r003.d	校正	5	2007/4/6 14:01
625 pg/μL	625pg-r001.d	校正	6	2007/4/6 14:03
625 pg/μL	625pg-r002.d	校正	6	2007/4/6 14:06
625 pg/μL	625pg-r003.d	校正	6	2007/4/6 14:09
1000 pg/μL	1000pg-r001.d	校正	7	2007/4/6 14:11
1000 pg/μL	1000pg-r002.d	校正	7	2007/4/6 14:14
1000 pg/μL	1000pg-r003.d	校正	7	2007/4/6 14:16

步骤	详细说明	注释
	b 单击**方法 > 编辑**切换到方法编辑模式。 **方法任务**显示在视图左侧的列中，如图 7 所示。	• 请注意，图 7 显示方法编辑的缺省布局。 • 如果未显示缺省布局，请单击工具栏中的**恢复缺省布局**，然后在下一步创建新方法。 恢复缺省布局(D)

步骤	详细说明	注释

图 7　方法编辑模式

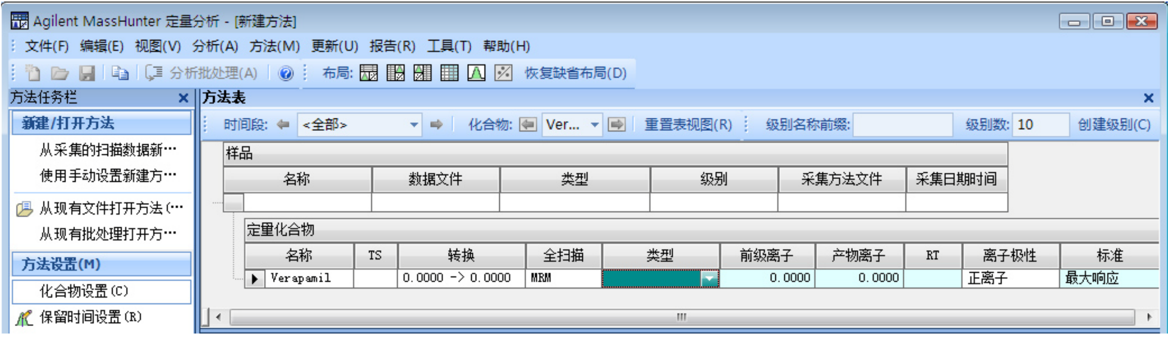
步骤	详细说明	注释
	c 在**样品信息**窗口中，单击峰的中部。右键单击并单击**提取质谱图**。 • 将显示质谱图 “+ Product Ion (0.644 min)(455.2910[z=1] -> **)”。 **d** 单击最大的离子 165.0927。右键单击该位置，然后单击**新建化合物**。 **e** 在**方法表**中输入 `Verapamil` 作为名称。	• 下图显示能将**样品信息**窗口中化合物添加到方法的快捷菜单。



任务 3. 设置目标化合物

通过此任务，您可以学习检查新定量方法的产物离子以及保留时间数据，并针对单个目标化合物进行更改。

步骤	详细说明	注释
1 检查在**样品信息**窗口中为产物离子创建的新定量方法。	a 在**方法表**窗口左侧的侧栏中的**方法任务**下方，单击**方法设置任务 > 化合物设置**。	



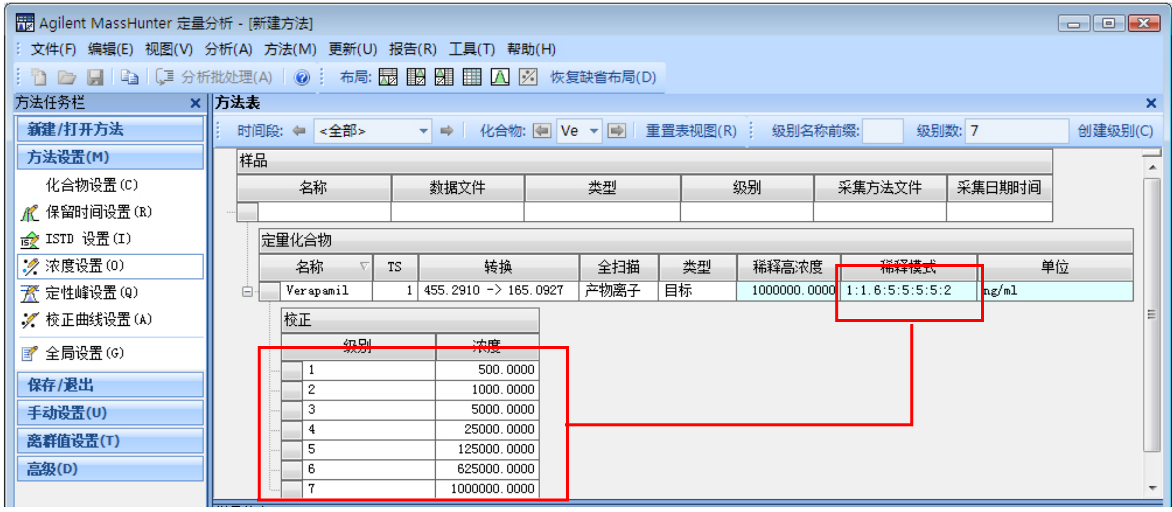
步骤	详细说明	注释
	b 要检查从质谱图设置的保留时间，请单击**方法设置 > 保留时间设置**。	• 您可以修改单个化合物的蓝色数据字段。

任务 4. 设置定量

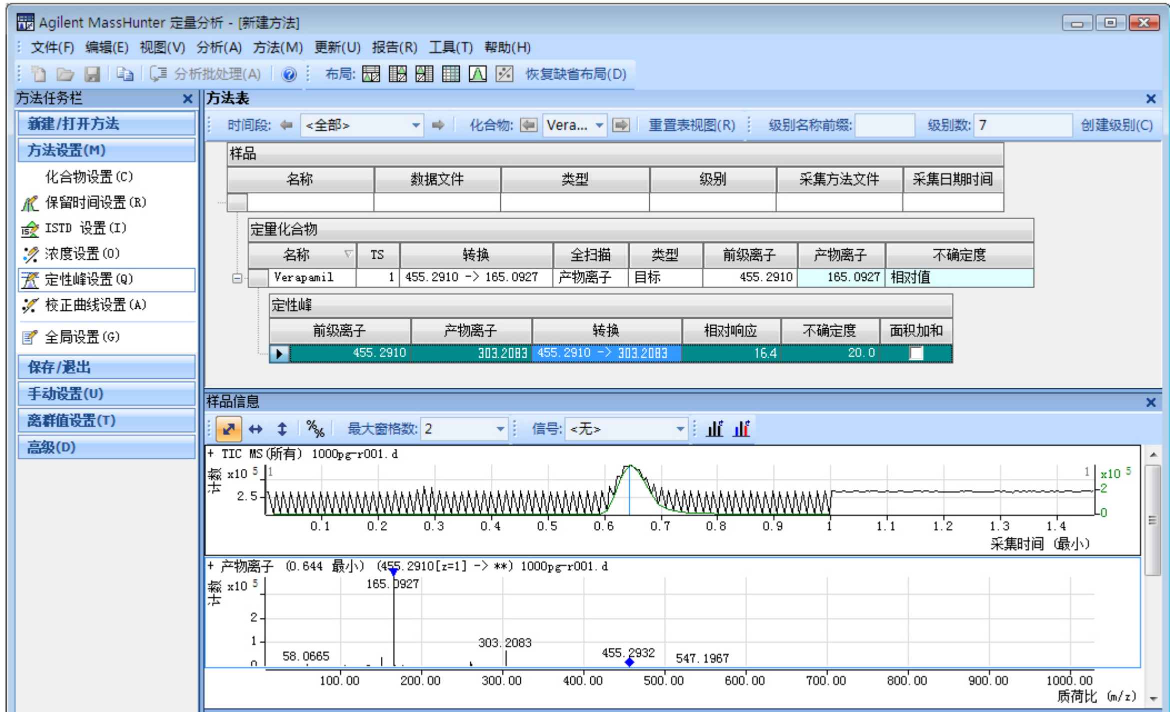
此任务说明如何为方法的下列数据设置定量参数：

- 校准级别
- 定性离子
- 校准曲线拟合

步骤	详细说明	注释
1 为每个化合物创建五个校准级别。 • 将戊脉安的具有最高浓度的化合物设置为 125。 • 将戊脉安的稀释模式设置为 1:1.6:5:5:5:5:2。 • 比较该稀释模式下七个级别的浓度。	**a** 单击**方法设置任务 > 浓度设置**，然后在戊脉安的**稀释高浓度**列中输入 1000.000。 **b** 在戊脉安的**稀释模式**列中输入 1:1.6:5:5:5:5:2。 **c** 确保**系列稀释**工具栏中的**级别名称前缀**是空的，**级别数**是 **7**。	
	d 单击**创建级别**。 **e** 比较稀释高浓度和稀释模式下新创建的校准级别的浓度。	



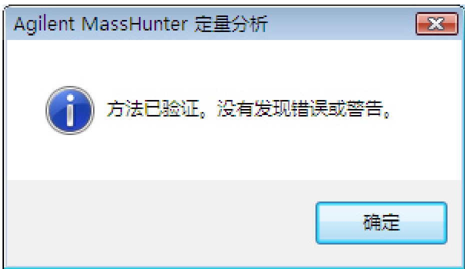
步骤	详细说明	注释
2 设置定性离子和校准曲线。 • 检查定性峰设置参数。 • 将 **CF 原点**设置为**包含**。	**a** 选择**样品信息**窗口中的质谱图 “+ Product Ion (0.644 min)(455.2910[z=1] -> **) 1000 pg-r001.d”。 **b** 单击 “303.2083”。右键单击该位置，然后单击**新建定性峰**。	• 您可以选择多个定性离子。 • 蓝色三角形表示在质谱图中选定的 *m/z*。 • 要添加 **CF 原点**列，请用右键单击定量程序表，然后选择**添加列 > CF 原点**。



步骤	详细说明	注释
	c 单击**方法任务 > 校准曲线设置**。 **d** 对于每个戊脉安化合物，将 **CF 原点**更改为**包含**。	



步骤	详细说明	注释
3 验证并保存方法。	**a** 单击**保存 / 退出 > 验证**，验证方法设置。	• 您可以在屏幕底部查看发生的任何验证错误。



b 在显示验证消息后，单击**确定**。

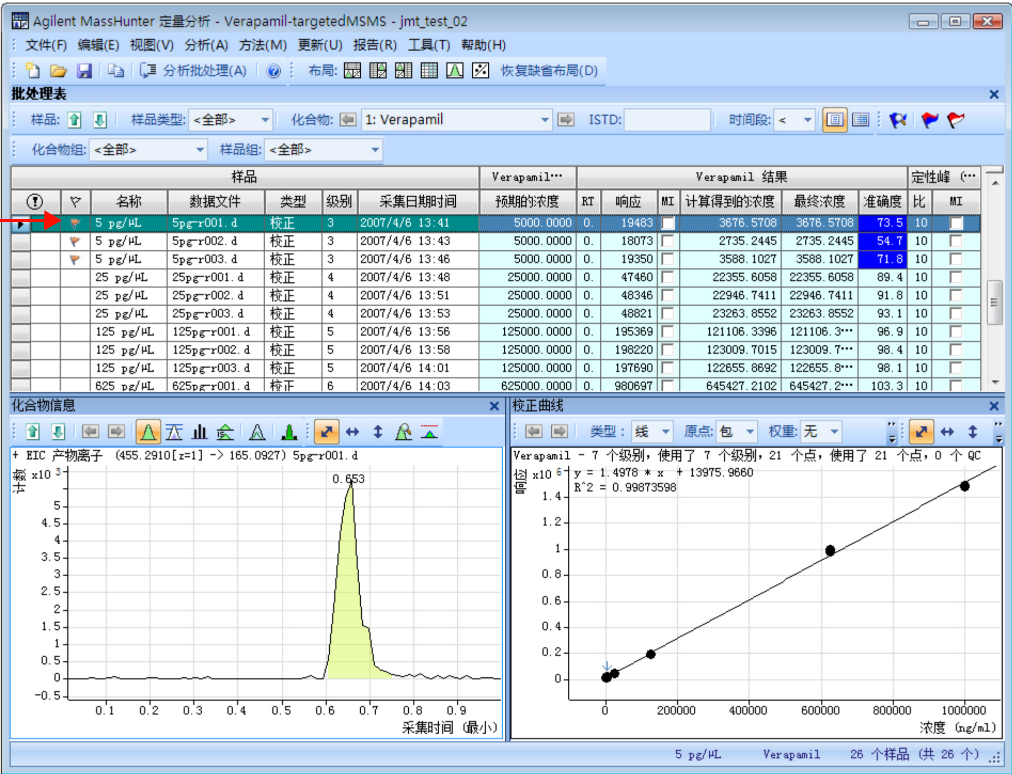
c 单击**保存 / 退出 > 退出**，然后在显示**是否要将此方法应用于批处理?** 提示时单击**是**。

任务 5. 分析和保存批处理

在本练习中，您将自动定量批处理，然后保存结果。

步骤	详细说明	注释
1 分析批处理，检查每个化合物的结果。 • 检查定量消息，它将显示没有定量信号的样品。 • 检查离群值标记消息。	**a** 单击工具栏中的**分析批处理**图标 分析批处理(A) 开始批处理 **b** 使光标经过前两个校准标准的标记。	• 请注意，三个校准标准都具有**准确度**的离群值标记。

离群值标记消息



步骤	详细说明	注释
2 保存批处理。	**a** 单击**文件 > 保存批处理**。 **b** 单击**文件 > 关闭批处理**以关闭批处理。	

练习 3
检查定量结果

任务 1. 浏览批处理表结果 44
任务 2. 更改结果窗口布局 50
任务 3. 导出和打印结果 57

此练习中的任务说明如何检查批处理文件中的样品和化合物数据、自定义结果布局、将数据导出到 Microsoft Excel 以及预览和打印数据。

在本练习中将使用 **DrugsOfAbuse** 批处理。可使用三重四极杆数据文件、Q-TOF 数据文件和 TOF 数据文件执行相同的任务。

我们将每一个练习的内容都放在了一个表中，每个表中分别包含以下三列：

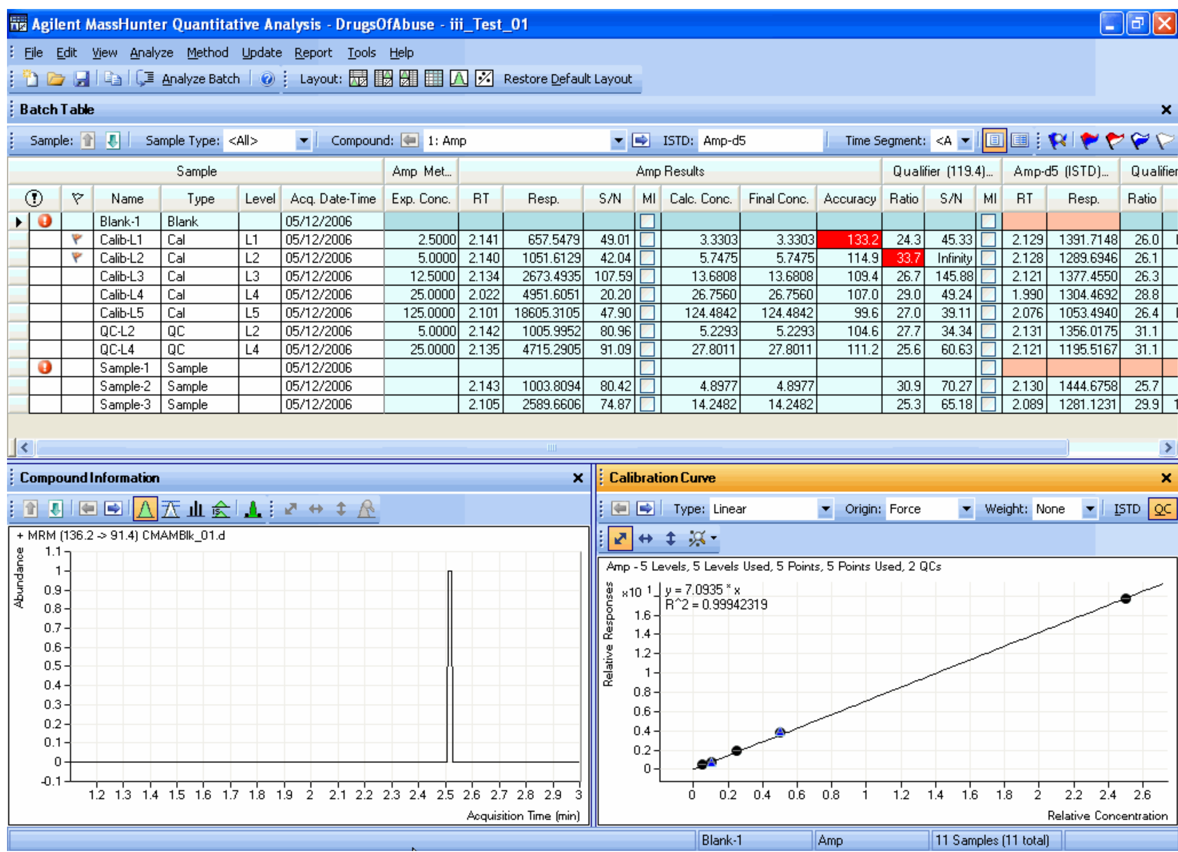
- 步骤 – 通过这些常规说明自学使用此程序。
- 详细说明 – 如果您需要帮助或更喜欢使用步进学习方式，则可使用这些说明。
- 注释 – 阅读这些注释可了解有关练习中的每个步骤的提示和其他信息。



任务 1. 浏览批处理表结果

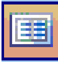
此任务说明如何浏览样品和化合物，观察批处理表中的变化以及化合物信息数据。该任务还说明如何显示各种样品类型。

步骤	详细说明	注释
1 打开在练习 2 中创建的批处理文件 ***iii*_Test_01.batch.xml**。	**a** 要启动定量分析程序，请单击桌面上的**定量分析**图标。 **b** 单击工具栏中的**打开批处理**以显示**打开批处理**对话框。 **c** 浏览至 \ ***您的目录*** **\DrugsOfAbuse** 并单击 ***iii*_Test_01.batch.xml**。	• 所显示的主视图应如下所示。这是缺省布局，包含缺省列设置。



步骤	详细说明	注释
2 （可选）如果所显示的布局与上一页的图中的布局不同 ... • 如果主视图中显示少于三个窗口，或它们的排列方式不同，请恢复缺省布局。 • 如果列设置不同，请恢复缺省列设置。 • 如果**化合物信息**窗口中显示除 " 色谱图 " 窗格以外的其他窗格，请隐藏其他窗格。	• 要恢复缺省布局，请在从一个样品滚动到另一个样品之前，单击工具栏中的**恢复缺省布局**。 恢复缺省布局(D) • 要恢复缺省列设置，请在**批处理表**窗口中的任意位置上单击右键，然后单击**恢复缺省列**。 • 要隐藏其他窗格，请单击化合物信息工具栏中除 " 显示 / 隐藏色谱图 " 图标 以外的高亮显示的图标。	• 缺省布局是在出厂时设置好的，不能更改。如果您要创建自己的布局，请参见第 50 页的 " 任务 2. 更改结果窗口布局 " 。
3 在样品之间滚动，直到达到**批处理表**末尾，然后返回到 Cal-L5。 • 使用工具栏中的 " 下一个样品 " 和 " 上一个样品 " 箭头 。 • 记下**批处理表**以及每个样品的安非他明**化合物信息**中的变化。 • 选择**批处理表**中的样品 **Calib_L4** 以查看**批处理表**和**化合物信息**变化。	**a** 单击批处理表标准工具栏中的**下一个样品**箭头 ，直到系统显示所需的样品。 检查**化合物信息**窗口中的变化。 **b** 要返回到 Cal-L5，请单击批处理表标准工具栏中的**上一个样品**图标 。 **c** 选择**批处理表**窗口中样品 **Calib_L4** 行中的任何单元格，以查看变化。	• 记下**批处理表**中高亮显示的数据文件和**化合物信息**窗口中的色谱图之间的链接。

步骤	详细说明	注释
4 在所有四个化合物之间滚动浏览。 • 使用工具栏中的 " 下一个化合物 " 和 " 上一个化合物 " 箭头。	a 单击工具栏中的**下一个化合物**或**上一个化合物**箭头，直到系统显示所需的化合物。	
化合物: 1: Amp		
• 检查化合物之间**批处理表**、**化合物信息**和**校准曲线**窗口的不同之处。 • 从列表中选择**可卡因**。	b 检查**批处理表**、**化合物信息**和**校准曲线**窗口中的变化。 c 单击**化合物**列表旁边的向下箭头。 d 单击**可卡因**。	

步骤	详细说明	注释
5 检查多个化合物的结果。 • 查看 Cal-L4 样品的每个化合物的保留时间。 • 在检查所有化合物的结果后，返回查看可卡因结果。	**a** 单击工具栏中的**多个化合物 / 样品视图**图标，以显示所有目标化合物的定量结果。还可以单击**视图 > 批处理表布局 > 多个化合物 / 样品视图**。  **b** 单击 Cal-L4 单元格，记下**化合物信息**窗口中每个化合物的**保留时间**差异。	在处于 " 多个化合物 / 样品视图 " 模式和 " 单个化合物视图 " 模式中时，将显示不同的一组列。如果在处于 " 多个化合物 / 样品视图 " 模式中时在表中添加列，这个变化不会自动反映在 " 单个化合物 / 样品视图 " 模式中。

Agilent MassHunter 定量分析 - DrugsOfAbuse - jmt_test_01

文件(F) 编辑(E) 视图(V) 分析(A) 方法(M) 更新(U) 报告(R) 工具(T) 帮助(H)

分析批处理(A) 布局: 恢复缺省布局(D)

批处理表

样品: 样品类型: <全部> 化合物: 1: Amp ISTD: Amp-d5 时间段: <

样品							Amp 结果			Meth 结果			MDMA 结果			Cocaine 结果		
		名称	数据文件	类型	级别	采集日期时间	RT	最终浓度	准确度	RT	最终浓度	准确度	RT	最终浓度	准确度	RT	最终浓度	准确度
		Blank-1	CMAMBlk_01.d	空白		2006/5/12 13:48				1.338	9.8674		2.466	7.1863		2.433	11.8257	
		Calib-L1	CMAMCal_L1.d	校正	L1	2006/5/12 13:51	2.	3.2892	131.6	2.247	2.5935	103.7	2.276	2.2841	91.4	2.453	2.3071	92.3
		Calib-L2	CMAMCal_L2.d	校正	L2	2006/5/12 13:54	2.	5.7070	114.1	2.248	5.0785	101.6	2.277	4.6564	93.1	2.454	4.2642	85.3
		Calib-L3	CMAMCal_L3.d	校正	L3	2006/5/12 13:57	2.	13.5610	108.5	2.247	15.1411	121.1	2.277	11.2840	90.3	2.459	11.5485	92.4
		Calib-L4	CMAMCal_L4.d	校正	L4	2006/5/12 14:00	2.	26.5517	106.2	2.228	27.1962	108.8	2.264	24.9231	99.7	2.449	25.2489	101.0
		Calib-L5	CMAMCal_L5.d	校正	L5	2006/5/12 14:03	2.	124.5···	99.6	2.237	124.2916	99.4	2.271	125.1550	100.1	2.448	125.0787	100.1
		QC-L2	CMAMQC_L2.d	QC	L2	2006/5/12 14:06	2.	5.1873	103.7	2.248	5.2313	104.6	2.276	4.8686	97.4	2.453	4.2813	85.6
		QC-L4	CMAMQC_L4.d	QC	L4	2006/5/12 14:09	2.	27.6514	110.6	2.246	27.7396	111.0	2.276	23.0488	92.2	2.455	24.5474	98.2
		Sample-1	CMAMSam_01.d	样品		2006/5/12 14:12				2.474	3.6177		2.315	5.6272				
		Sample-2	CMAMSam_02.d	样品		2006/5/12 14:15	2.	4.8422		2.250	5.7917		2.280	5.1811		2.460	4.3755	
		Sample-3	CMAMSam_03.d	样品		2006/5/12 14:18	2.	14.1047		2.236	14.1504		2.267	10.7917		2.446	10.9430	
		Sample-···	CMAMSam_add···	样品		2006/11/11 11:00												

c 要返回显示选定目标化合物的详细定量结果，请单击工具栏中的**单个化合物 / 样品显示**图标。 

d 如果需要，单击**化合物**列表旁边的向下箭头，然后单击**可卡因**。

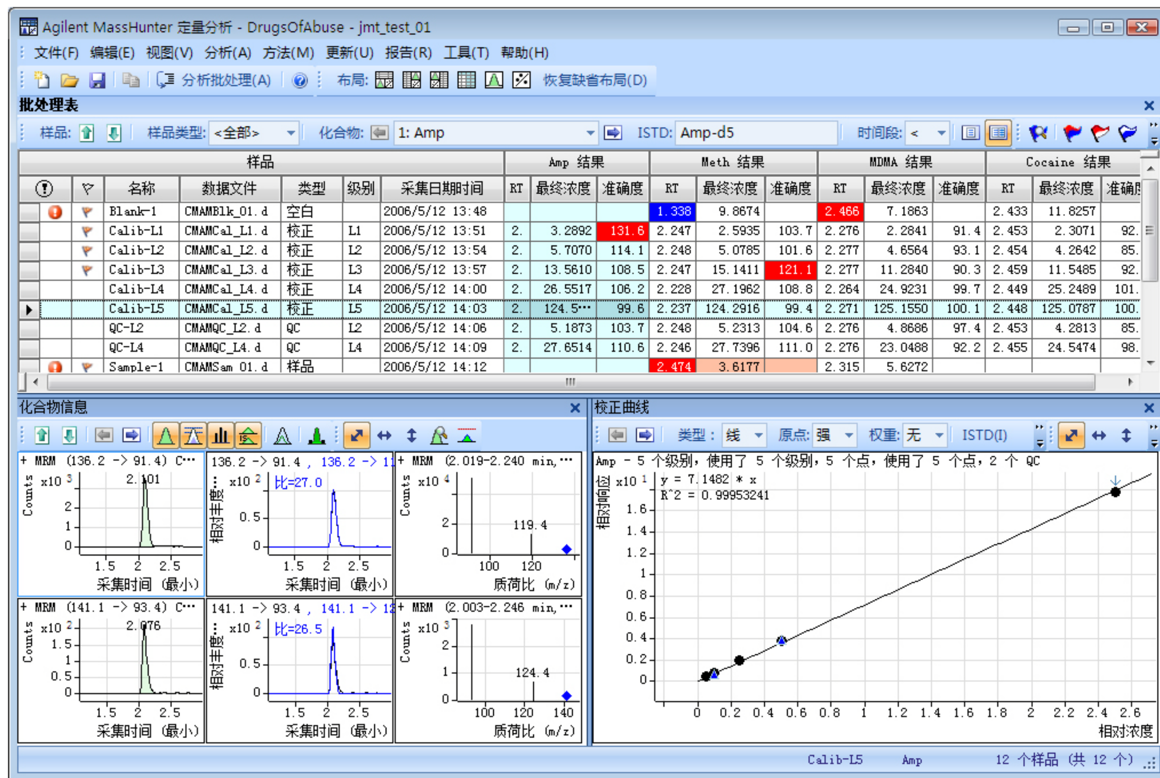
步骤	详细说明	注释
6 查看选定的样品类型。 • 仅显示校准标准。 • 然后显示所有样品类型。	**a** 单击**样品类型**下拉列表中的向下箭头。将显示**样品类型**对话框。 **b** 清除 **< 全部 >** 复选框，并选中**校准**复选框。 **c** 单击**确定**。 **批处理表**应只包含可卡因的**校准**标准。 **d** 单击**样品类型**下拉列表中的向下箭头。 **e** 单击 **< 全部 >**，然后单击**确定**。 系统将选中所有复选框并显示所有样品类型。	

任务 2. 更改结果窗口布局

此任务说明如何使用工具栏图标自定义布局以及如何重新创建缺省布局。

步骤	详细说明	注释
1 使用工具栏中的布局图标定位**批处理表**、**化合物信息**和**校准曲线**窗口。 • 缺省布局称为 " 表顶部 "，因为批处理表在主视图的顶部。 • 将布局更改为 " 表左侧 "，然后更改为 " 表右侧 "。 • 返回到 " 表顶部 " 布局。	**a** 单击工具栏中的**布局 – 表左侧**图标 。 **b** 单击工具栏中的**布局 – 表右侧**图标 。 **c** 单击**布局 – 表顶部**图标 。	
2 使用工具栏中的布局图标使每个窗口最大化： • 表 • 化合物信息 • 校准曲线 • 返回到缺省布局	**a** 单击工具栏中的**最大化表**图标 。 **b** 单击工具栏中的**最大化化合物信息**图标 。 **c** 单击工具栏中的**最大化校准曲线**图标 。 **d** 要返回到缺省布局，请单击工具栏中的**恢复缺省布局**图标。	
3 更改**化合物信息**窗口中 Cal-L4 的窗格。 • 显示定性离子 • 显示质谱图 • 显示 ISTD 色谱图、定性离子和质谱图	**a** 在**批处理表**中，选择 **Cal-L4** 行。 **b** 在化合物信息工具栏中，单击**显示 / 隐藏定性峰**图标 。 **c** 单击**显示 / 隐藏质谱图**图标 。 **d** 单击**显示 / 隐藏 ISTD** 图标 。 布局和结果如下一页的图中所示。	• 此步骤假设您使用**化合物信息**窗口中的 " 色谱图 " 窗格开始执行此任务。 • 更改布局只会更改六个窗格的位置和可见性。**化合物信息**窗口中的窗格不受更改布局的影响。

步骤	详细说明	注释



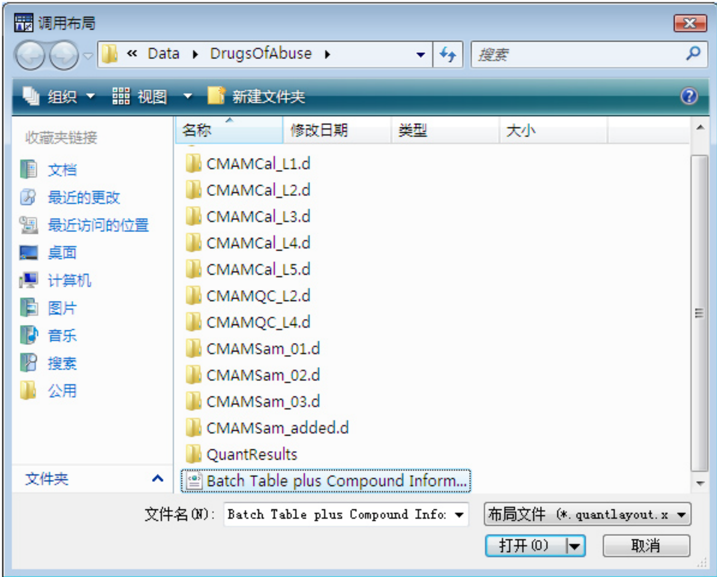
4 保存没有校准曲线的缺省布局。

- 将新布局作为**批处理表和化合物信息**保存在 **DrugsOfAbuse** 文件夹中。

a 关闭**校准曲线**窗口。

b 单击**视图 > 窗口布局 > 保存布局**。
系统将显示**保存布局文件**对话框。

c 将布局文件命名为**批处理表和化合物信息**，然后单击**保存**。

步骤	详细说明	注释
5 调用新创建的布局。 • 恢复缺省布局。 • 调用布局**批处理表和化合物信息**。	**a** 单击工具栏中的**恢复缺省布局**。 **b** 单击**视图 > 窗口布局 > 调用布局**。 系统将显示**调用布局**对话框。  **c** 单击**批处理表和化合物信息**，然后单击**打开**。 现在，结果窗口如图 8 所示。	

步骤	详细说明	注释



图 8　　结果窗口

步骤	详细说明	注释
6 创建如第 54 页上的图 9 所示的布局，其中的**校准曲线**和**化合物信息**窗口处于浮动状态。 提示：**批处理表**等其他信息显示在左侧。	**a** 恢复缺省布局（单击工具栏中的**恢复缺省布局**）。 **b** 在**校准曲线**窗口的标题栏中单击右键，然后选中**浮动**复选框。 **c** 右键单击**化合物信息**窗口的标题栏，然后选中**浮动**复选框。 **d** 调整窗口大小，以便与图 9 中的布局一致。	

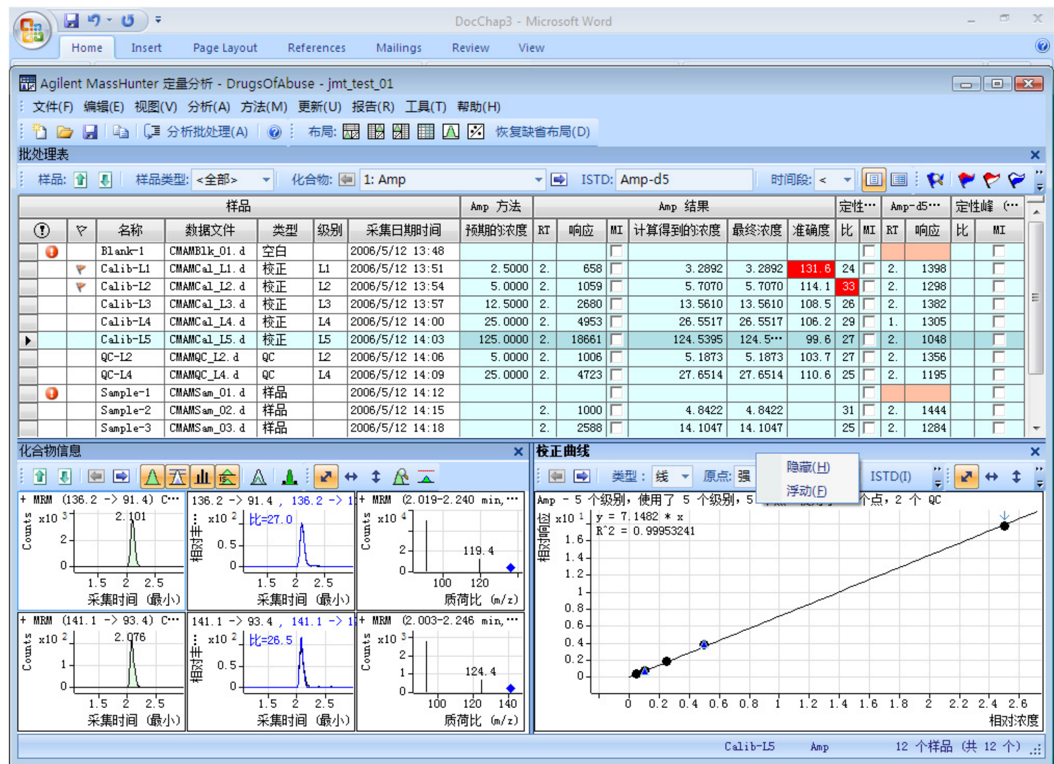


图 9　显示处于浮动状态的 " 校准曲线 " 和 " 化合物信息 " 窗口

步骤	详细说明	注释
	e 在**化合物信息**窗口的标题栏中右键单击，然后清除**浮动**复选框。 **f** 调整窗口大小，以便与图 10 中的布局一致。	

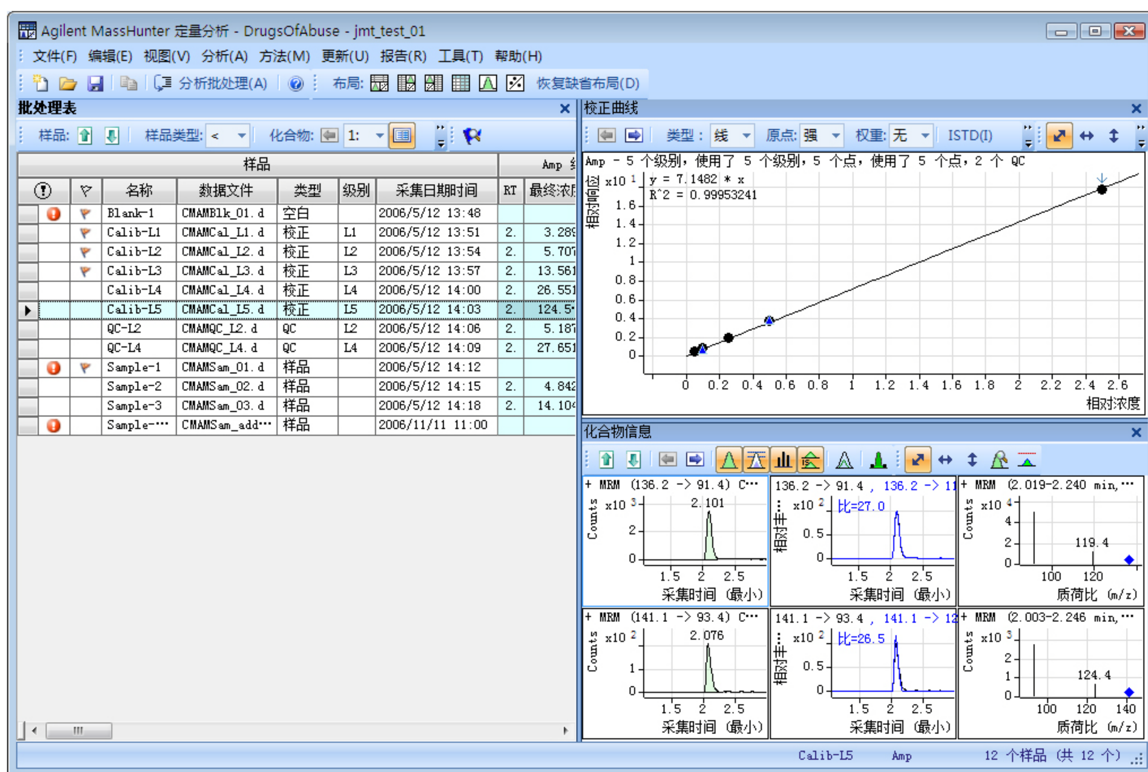


图 10 调整大小后的窗口

步骤	详细说明	注释
	g 在**校准曲线**窗口的标题栏中单击右键，然后清除**浮动**复选框。 **h** 移动**化合物信息**窗口，使布局对应于在任务开始时所显示的图中的布局。	
7 重新创建（不恢复）缺省布局。 • 在此步骤中，您将学习不使用布局图标或**恢复缺省布局**来重新创建布局。	**a** 使程序主视图最大化。	• 必须先锚定**校准曲线**窗口，然后锚定**化合物信息**窗口，这样才能重新创建缺省布局。 • 如果在锚定两个窗口后，校准曲线位于左侧，则可右键单击**校准曲线**窗口的标题栏，然后将其移至右侧。将绘制一个灰色矩形，显示该窗口将放置在主视图中的位置。将校准曲线拖至主视图的右下角。

任务 3. 导出和打印结果

此练习说明如何将数据导出到 Microsoft Excel 文件，以及如何预览和打印批处理表及化合物信息数据。

步骤	详细说明	注释
1 导出批处理文件 ***iii*_Test_01**。 • 指定 " 我的文档 " 作为目标目录。 • 使用 ***iii*_Test_01.xls** 作为导出文件名，其中 "*iii*" 表示您的姓名首字母。	**a** 要激活**批处理表**窗口，请单击**批处理表**窗口的标题栏。 **b** 单击**文件 > 导出 > 导出表**。 **c** 指定**我的文档**作为目标目录。 **d** 输入 `iii_Test_01.xls` 作为导出文件名。 **e** 单击**保存**。	



图 11 导出结果

步骤	详细说明	注释
2 查看显示在 Excel 中的批处理结果，然后退出 Excel。 • 记下导出和未导出的内容。	**a** 启动 Microsoft Excel。 **b** 打开**我的文档 *iii*_Test_01.xls**。 **c** 记下导出和未导出的内容。 **d** 完成后，关闭 Excel。	

步骤	详细说明	注释

jmt_test_01 [Compatibility Mode] - Microsoft Excel

A1 样品

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	R	S	T
1	样品							Amp 方法	Amp 结果						6.2 -> 1		b-d5 (ISTD)		141.1 -> 124	
2			名称	数据文件	类型	级别	采集日期时间	预期的浓度	RT	响应	MI	计算得到的浓度	最终浓度	准确度	比	MI	RT	响应	比	MI
3	Amp-d5:		Blank-1	CMAMBlk_01.d	空白		2006/5/12 13:48				##					##				FALSE
4		Amp	Calib-L1	CMAMCal_L1.d	校正	L1	2006/5/12 13:51	2.5	2	657.55	##	3.289177366	3.28918	131.6	24	##	2	1398		FALSE
5		Amp	Calib-L2	CMAMCal_L2.d	校正	L2	2006/5/12 13:54	5	2	1059.1	##	5.707033166	5.70703	114.1	33	##	2	1298		FALSE
6			Calib-L3	CMAMCal_L3.d	校正	L3	2006/5/12 13:57	12.5	2	2679.9	##	13.5610074	13.561	108.5	27	##	2	1382		FALSE
7			Calib-L4	CMAMCal_L4.d	校正	L4	2006/5/12 14:00	25	2	4953	##	26.55172164	26.5517	106.2	29	##	2	1305		FALSE
8			Calib-L5	CMAMCal_L5.d	校正	L5	2006/5/12 14:03	125	2	18661	##	124.5394901	124.539	99.63	27	##	2	1048		FALSE
9			QC-L2	CMAMQC_L2.d	QC	L2	2006/5/12 14:06	5	2	1005.6	##	5.187311945	5.18731	103.7	28	##	2	1356		FALSE
10			QC-L4	CMAMQC_L4.d	QC	L4	2006/5/12 14:09	25	2	4722.9	##	27.65144199	27.6514	110.6	26	##	2	1195		FALSE
11	Amp-d5:		Sample-1	CMAMSam_01.	样品		2006/5/12 14:12				##					##				FALSE
12			Sample-2	CMAMSam_02.	样品		2006/5/12 14:15		2	999.61	##	4.84215371	4.84215		31	##	2	1444		FALSE
13			Sample-3	CMAMSam_03.	样品		2006/5/12 14:18		2	2588.4	##	14.10467025	14.1047		25	##	2	1284		FALSE
14	Amp-d5:		Sample-ad	CMAMSam_add	样品		2006/11/11 11:00				##					##				FALSE

Sheet1

Ready 100%

图 12　Excel 中的批处理表

步骤	详细说明	注释
3 预览批处理表和化合物信息数据的打印输出。 • 打印批处理表和化合物信息。 • 如果不想立即执行练习 4，则保存并退出批处理。	**a** 在**批处理表**窗口的标题栏中单击，然后单击**文件 > 打印预览**。在 Excel 2010 中，单击**文件 > 打印**。 **b** 检查**打印预览**窗口中**批处理表**的显示，确保它以所需的方式显示。 **c** 关闭**打印预览**窗口。 **d** 如果对**批处理表**感到满意，请单击**文件 > 打印**。 **e** 对化合物信息重复步骤 a-d。 **f** 如果不想进行练习 4，请单击**文件 > 保存批处理**。 **g** 单击**文件 > 退出**。	您也可以从**打印预览**程序打印**批处理表**，方法是单击**打印预览**程序中的**文件 > 打印**菜单项。

练习 4
使用三个工具评估结果

任务 1. 调整校准曲线拟合 60
任务 2. 进行无参数积分 63
任务 3. 检测离群值 77

在此练习中，您将使用三个工具帮助评估并获得更准确的定量结果：

- 曲线拟合助手，该工具将计算曲线的所有组合，并使用方程和置信带显示结果
- 无参数积分器，无需设置更改参数就可以改进积分结果
- 离群值消息，该工具可帮助您容易地检测出超出指定范围的结果值

在本练习中将使用 DrugsOfAbuse 批处理。可使用三重四极杆数据文件、 Q-TOF 数据文件和 TOF 数据文件执行相同的任务。

我们将每一个练习的内容都放在了一个表中，每个表中分别包含以下三列：

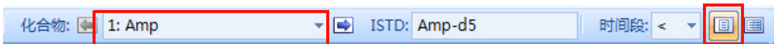
- 步骤 – 通过这些常规说明自学使用此程序。
- 详细说明 – 如果您需要帮助或更喜欢使用步进学习方式，则可使用这些说明。
- 注释 – 阅读这些注释可了解有关练习中的每个步骤的提示和其他信息。



任务 1. 调整校准曲线拟合

此任务说明如何查找化合物的准确度离群值、调整其曲线拟合以及重新分析批处理。

步骤	详细说明	注释
1 如果需要，打开批处理文件 ***iii*_Test_01.batch.xml**。 如果批处理已打开，则跳至步骤 2。	**a** 要启动定量分析程序，请单击桌面上的 **QuantitativeAnalysis (QQQ)** 图标 。 **b** 单击工具栏中的**打开批处理** 以显示**打开批处理**对话框。 **c** 浏览至 \ ***您的目录*** **\DrugsOfAbuse** 并单击 ***iii*_Test_01.batch.xml**。	• 也可以通过单击 " 开始 " 菜单中的**程序 > Agilent > MassHunter 工作站 > 定量分析 (QQQ)** 来访问该程序。 • 如果未显示缺省布局，请单击工具栏中的**恢复缺省布局**，然后再打开批处理。 恢复缺省布局(D)
2 查找安非他明的准确度离群值，并更改曲线拟合。 • 将**原点**设置为**忽略**，将**权重**设置为 **1/y**。	**a** 确保将**批处理表**设置为单个化合物显示模式，并且所显示的目标化合物为**安非他明**。请参见下图中带框的部分。	
	b 指向 **Calib-L1** 行中的单元格以及**准确度**列，以显示离群值消息，如下所示。	• 包含离群值的单元格可能是红色（高）或蓝色 （低）。



Agilent MassHunter 定量分析 - DrugsOfAbuse - jmt_test_01

文件(F) 编辑(E) 视图(V) 分析(A) 方法(M) 更新(U) 报告(R) 工具(T) 帮助(H)

分析批处理(A) 布局: 恢复缺省布局(D)

批处理表

样品: 样品类型: <全部> 化合物: 1: Amp ISTD: Amp-d5

样品							Amp 方法	Amp 结果				
!		名称	数据文件	类型	级别	采集日期时间	预期的浓度	RT	响应	MI	计算得到的浓度	最终浓度
!		Blank-1	CMAMBlk_01.d	空白		2006/5/12 13:48						
		Calib-L1	CMAMCal_L1.d	校正	L1	2006/5/12 13:51	2.5000	2.	658		3.2892	3.289
						54	5.0000	2.	1059		5.7070	5.707
						57	12.5000	2.	2680		13.5610	13.561
		Calib-L4	CMAMCal_L4.d	校正	L4	2006/5/12 14:00	25.0000	2.	4953		26.5517	26.551

离群值
Amp: 准确度值 = 131.6 在允许的范围 [80.0, 120.0] 之外

步骤	详细说明	注释
	c 在**校准曲线**窗口中，将**原点**设置为**忽略**，将**权重**设置为 **1/y**。程序将显示新的曲线拟合分子式以及 R^2 值。	曲线拟合原点 • **强制** – 强制曲线拟合线通过原点（X=0， Y=0）。 • **忽略** – 不强制曲线拟合线使用原点 （X=0， Y=0）。 曲线拟合权重 • **无** – 对所有数据点指定相同的权重。 • **1/Y** – 将分子式 1/Y 应用于数据点。此分子式将减少高 Y 值的影响，同时增加低 Y 值的影响。
3 分析批处理，并检查**批处理表**中的结果。	**a** 单击工具栏中的**分析批处理**图标 分析批处理(A)，以分析批处理。 **b** 分析批处理后，检查**批处理表**中的结果。	
4 查找其他化合物的准确度离群值 （如果有）。	**a** 单击批处理表工具栏中的**下一个化合物**，以查看单个化合物，如可卡因、 MDMA 和甲基苯丙胺。 **b** 检查定量结果，特别是**准确度**列中的值。	• 请注意，安非他明的 Calib-L3 标准的准确度值超出了指定范围。

校正曲线 — 类型：线；原点：强；权重：无
Amp – 5 个级别，使用了 5 个点，使用了 5 个
y = 7.1482 * x
R^2 = 0.99953241
原点选项：忽略 / 包含 / 强制 / 空白偏移

准确度
131.6
114.1
108.5
106.2
99.6
103.7
110.6

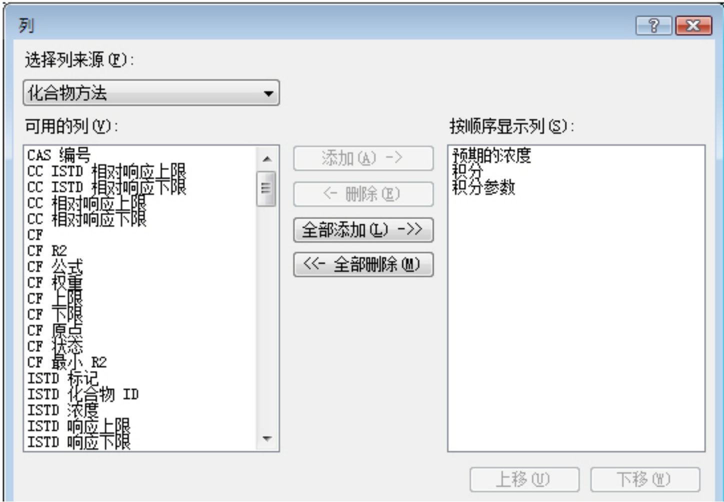
步骤	详细说明	注释
5 更改安非他明的曲线拟合，然后分析批处理。	**a** 在**校准曲线拟合**窗口中，将**原点**设置为**忽略**，将**权重**设置为 **1/y**。 定量分析程序将显示修改后的曲线拟合分子式以及 R2 值。 **b** 单击主工具栏中的**分析批处理**，以分析批处理。 分析批处理(A) 分析批处理后，**批处理表**将显示新结果。	

任务 2. 进行无参数积分

此任务说明如何检查数据以正确进行积分。您将学习如何执行下列任务：

- 将积分列添加到批处理表
- 查看缺省积分值
- 仔细检查色谱图，查看如下详细信息：
  - 离群值消息
  - 基线参数
  - 峰标签

步骤	详细说明	注释
1 将积分列添加到批处理表。 • 从化合物方法列表添加积分器类型和积分器参数列。 • 从化合物结果列表将积分器规格列添加到批处理表。	**a** 在**批处理表**的任意位置上右键单击，然后单击**添加 / 删除列**。 系统将显示**列**对话框。 **b** 从**列来源**下拉列表中选择**化合物方法**。 **c** 从可用列列表中选择**积分器**（积分器类型）和**积分器参数**（积分器参数），然后单击**添加**。 定量分析程序将选定的列移至**按顺序显示这些列**列表。	• 此任务假设已打开了批处理 ***iii*_Test_01**。如果未打开，请参见任务 1 中的步骤 1。



步骤	详细说明	注释
	d 从**列来源**下拉列表中选择**化合物结果**。 **e** 从可用列列表中选择**积分器规格**（积分器规格），然后单击**添加**。系统将选定的列移至**按顺序显示这些列**列表。 **f** 单击**确定**。	



步骤	详细说明	注释
2 查看安非他明的缺省积分值。 • 查看**积分器**类型和**积分器参数**列。 • 查看**积分器规格**列。	**a** 单击批处理表工具栏中的**上一个化合物** ，查看安非他明（**安非他明**）。 **b** 检查**批处理表**中**积分器**和积分器参数列的缺省值。	• 请注意，所使用的缺省积分器是 MS-MS 积分器，该积分器不需要输入参数。这就是**积分器参数**列是空白的原因。

积分	积分参数
MS-MS (LC)	
MS-MS (LC)	
MS-MS (LC)	
MS-MS (LC)	
MS-MS (LC)	
MS-MS (LC)	
MS-MS (LC)	
MS-MS (LC)	
MS-MS (LC)	
MS-MS (LC)	

步骤	详细说明	注释
	c 检查批处理表 中积分器规格列的缺省值。	• 这些值反映了用于目标化合物安非他明的缺省积分质量规格。

1: Amp　ISTD: Amp-d5　时间段: <

	Amp 方法			Amp 结果						
采集日期时间	预期的浓度	积分	积分参数	RT	响应	MI	计算得到的浓度	最终浓度	准确度	积分
2006/5/12 13:48		MS-MS (LC)								
2006/5/12 13:51	2.5000	MS-MS (LC)		2.	658		3.2892	3.2892	131.6	Accep
2006/5/12 13:54	5.0000	MS-MS (LC)		2.	1059		5.7070	5.7070	114.1	Accep
2006/5/12 13:57	12.5000	MS-MS (LC)		2.	2680		13.5610	13.5610	108.5	Accep
2006/5/12 14:00	25.0000	MS-MS (LC)		2.	4953		26.5517	26.5517	106.2	Accep
2006/5/12 14:03	125.0000	MS-MS (LC)		2.	18661		124.5395	124.5…	99.6	Accep
2006/5/12 14:06	5.0000	MS-MS (LC)		2.	1006		5.1873	5.1873	103.7	Accep
2006/5/12 14:09	25.0000	MS-MS (LC)		2.	4723		27.6514	27.6514	110.6	Accep
2006/5/12 14:12		MS-MS (LC)								
2006/5/12 14:15		MS-MS (LC)		2.	1000		4.8422	4.8422		Accep

步骤	详细说明	注释
3 查看可卡因和 MDMA 的积分问题。 • 放大化合物信息工具栏的色谱图部分，以便仅显示定量离子和定性离子色谱图。 • 查看**积分器规格**列和 **Blank-1** 样品交点处的离群值消息。	**a** 关闭**校准曲线**窗口。 **b** 要放大化合物信息工具栏中的色谱图部分，请单击**显示 / 隐藏质谱图**图标。 化合物信息 **c** 也可以单击**显示 / 隐藏 ISTD** 图标。 **d** 单击批处理表工具栏中的**下一个化合物**图标 ，直到系统显示化合物**可卡因**。 **e** 选择 **Blank-1** 行，然后指向该行的**积分器规格**列。 系统将显示该数据的任何离群值消息，以及可卡因的积分色谱图。	

步骤	详细说明	注释
	f 单击批处理表标准工具栏中的**下一个化合物**图标 或“上一个化合物”图标 ，直到系统显示化合物 MDMA。 **g** 选择 **Blank-1** 行，然后指向该行的**积分器规格**列。 系统将显示该数据的任何离群值消息，以及 MDMA 的积分色谱图。	• 离群值消息显示“MDMA:Integrator found the following problems with the peak at RT = 2.4664: Interference Problem.”（MDMA：积分器在保留时间 = 2.4664 时发现峰具有下列问题：干扰问题。） • 请注意，下列颜色表示不同的积分规格： 绿色 - 已接受 蓝色 - 检查 红色 - 已拒绝 • 这些颜色也反映在峰颜色中。
4 更改噪音算法。 • 从化合物方法列表添加噪音算法列。 • 查看安非他明的**噪音算法**和 **S/N** 列中的值。	**a** 在**批处理表**的任意位置上右键单击，然后单击**添加 / 删除列**。 系统将显示**列**对话框。 **b** 从**列来源**下拉列表中选择**化合物方法**。 **c** 从可用列列表中选择**噪音算法**（噪音算法类型），然后单击**添加**。 系统将选定的列移至**按顺序显示这些列**列表。 **d** 单击**确定**。 **e** 单击批处理表工具栏中的**上一个化合物**图标 ，直到系统显示化合物安非他明。 **f** 检查**噪音算法**和 **S/N**（信噪比）列中的值。	

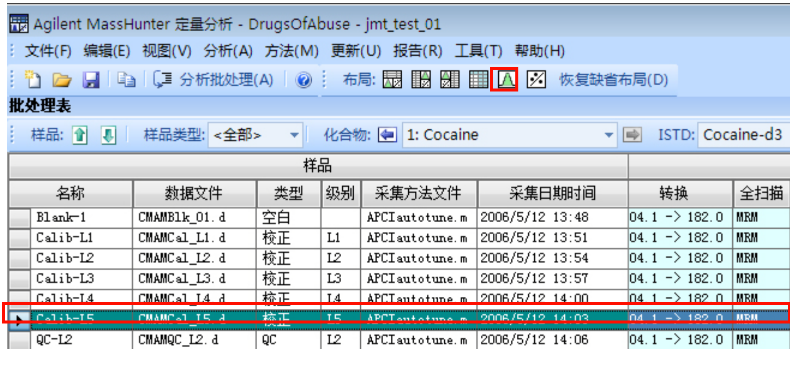
ISTD: Amp-d5　时间段: <全部>

在批处理表中显示单个化合物

	Amp 结果										mp-d5
噪音算法	RT	响应	MI	计算得到的浓度	最终浓度	准确度	积分规格	信噪比	比	MI	RT
RMS											
RMS	2.141	658		3.2892	3.2892	131.6	Accepted	48.96	24.3		2.129
RMS	2.140	1059		5.7070	5.7070	114.1	Accepted	42.25	33.5		2.128
RMS	2.134	2680		13.5610	13.5610	108.5	Accepted	106.52	26.6		2.121
RMS	2.022	4953		26.5517	26.5517	106.2	Accepted	20.26	29.0		1.990
RMS	2.101	18661		124.5395	124.5395	99.6	Accepted	51.59	27.0		2.076
RMS	2.142	1006		5.1873	5.1873	103.7	Accepted	80.96	27.6		2.131
RMS	2.135	4723		27.6514	27.6514	110.6	Accepted	98.30	25.6		2.121
RMS											
RMS	2.143	1000		4.8422	4.8422		Accepted	80.59	31.0		2.130
RMS	2.105	2588		14.1047	14.1047		Accepted	74.96	25.3		2.089
RMS											

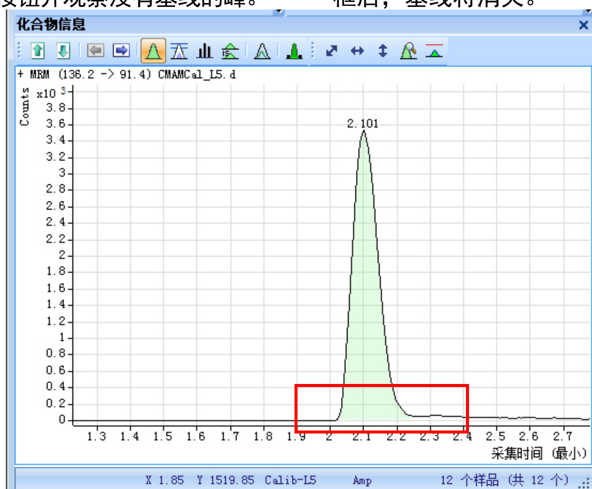
Blank-1　Amp　12 个样品（共 12 个）

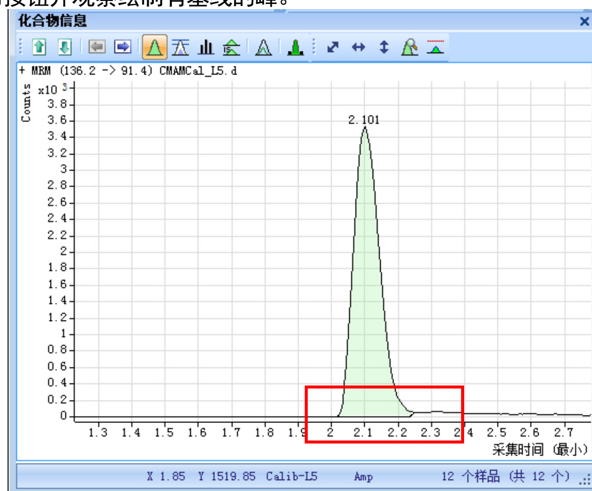
步骤	详细说明	注释
5 练习将方法中的安非他明的噪音算法从 RSM 更改为 ASTM。 • 退出但不保存方法。	**a** 单击**方法 > 编辑**切换到方法编辑模式。 **b** 单击**方法任务 > 高级任务 > 信噪比设置**。 系统将在**方法表**中显示积分器参数。 方法任务栏 新建/打开方法 方法设置(M) MRM 化合物设置 (M) 保留时间设置 (R) ISTD 设置 (I) 浓度设置 (O) 定性峰设置 (Q) 校正曲线设置 (A) 全局设置 (G) 保存/退出 验证 (V) 保存 (S) 另存为 (A)... 退出 (X) 手动设置(U) 离群值设置(T) 高级(D) 积分参数设置 (I) 信噪比设置 (G) 平滑设置 (M) 质量提取设置 (X) 同位素稀释设置 (S) 化合物设置 (C) 化合物 2D 设置 (2) 化合物谱库设置 (L) 浏览采集方法 (B) **c** 单击**方法表**中安非他明的**噪音算法**列。 将显示一列可用的噪音算法。 **d** 单击 **ASTM**。	

步骤	详细说明	注释
	 **e** 单击**方法任务 > 保存 / 退出 > 退出**。 **f** 在显示退出提示**是否要将此方法应用于批处理？**时单击**否**。 系统将显示批处理分析模式。	
6 关闭安非他明的基线（具有最高浓度的化合物标准），然后再次打开。 • 确保窗口中只显示 " 化合物信息 " 窗格。 • 比较两个色谱图：一个打开了基线，另一个关闭了基线。	**a** 选择样品 **Calib-L5**（如果未选中），然后单击工具栏中的**最大化化合物信息**图标。 	• 请注意，系统在定量色谱图中绘制基线，以作为缺省设置。

步骤	详细说明	注释
	b 右键单击任一色谱图，以打开快捷菜单。单击快捷菜单底部的**属性**以打开**属性**对话框。	

步骤	详细说明	注释
	c 清除**属性**对话框中的**基线**复选框。单击**应用**按钮并观察没有基线的峰。	• 请注意，在清除了 " 基线 " 复选框后，基线将消失。
	d 选中**属性**对话框中的**基线**复选框。单击**应用**按钮并观察绘制有基线的峰。	



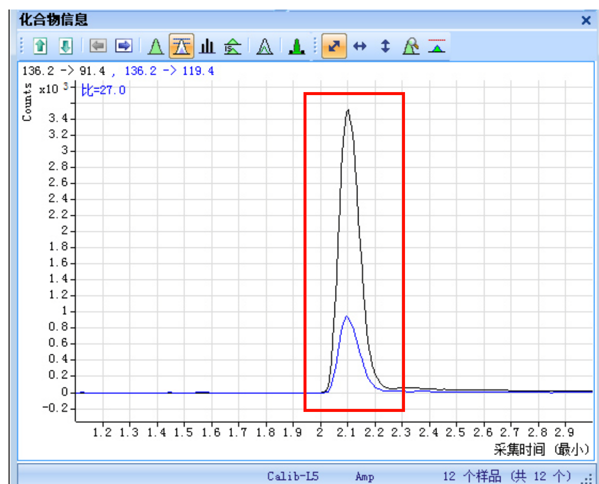


步骤	详细说明	注释
7 检查安非他明的基线的计算点。	**a** 选中**属性**对话框中的**基线计算点**复选框。 **b** 单击**应用**并观察基线开始点和结束点的位置。 **c** 清除**属性**对话框中的**基线计算点**复选框。 **d** 单击**应用**并观察色谱图。 **e** 比较具有基线计算点和没有基线计算点的色谱图。	

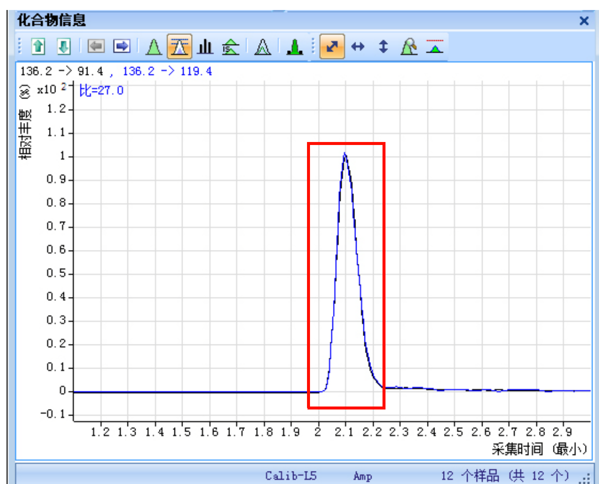
步骤	详细说明	注释
8 显示安非他明的峰标签。 • 在下一页显示在图中找到的峰标签。 • 然后显示原始保留时间峰标签。	**a** 单击**属性**对话框中的**峰标签**。 系统将显示**峰标签**对话框。 **b** 选中所有**峰标签**复选框以及**显示标签名称**复选框，然后单击**确定**。 化合物信息 峰标签 RT 名称 计算得到的浓度 峰高 面积 上移 下移 显示标签名(如 RT=2.452) 确定 取消 应用	

步骤	详细说明	注释
	c 单击**属性**对话框中的**应用**按钮。 现在，峰标签应与下面示例中显示的峰标签一致。	
	d 单击**属性**对话框中的**峰标签**。 系统将显示**峰标签**对话框。 **e** 清除除 RT（保留时间）以外的所有**峰标签**复选框。清除**显示标签名称**复选框，然后单击**确定**。 **f** 单击**属性**对话框中的**应用**并观察峰标签中的变化。	

步骤	详细说明	注释
9 在右侧显示归一化之前和之后的定性离子色谱图。	a 选中**属性**对话框的**定性峰**部分中的**归一化**复选框。单击**应用**并观察这两个峰现在是否合并显示为一个峰。	• 对于 B.04.01 及更高版本：请注意，缺省设置显示叠加在定量离子峰之上的归一化定性离子峰。



b 清除**属性**对话框中的**归一化定性离子**复选框。单击**应用**以再次显示定性离子和定量离子峰。

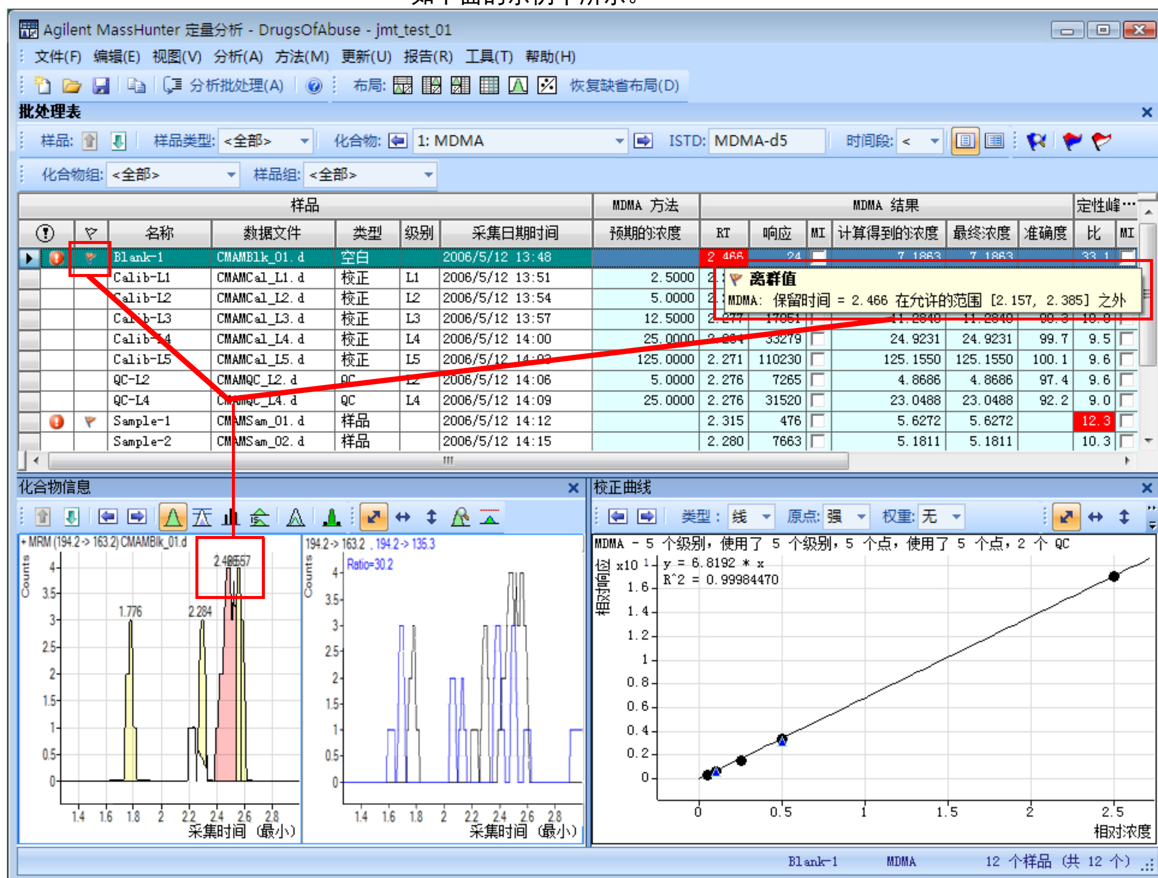


步骤	详细说明	注释
10 查看不确定性带。	**a** 从**属性**对话框的**不确定性带**字段的下拉菜单中选择要显示的不确定性带的类型。单击**应用**，不确定性带即显示在定性离子色谱图中。 **b** 从**属性**对话框的**不确定性带**下拉菜单中选择**无带**。单击**应用**可从定性离子色谱图中删除不确定性带。 **c** 单击**确定**以关闭**属性**对话框。 **d** 比较具有和不具有**不确定性带**的定性离子色谱图。	• 不确定性带 - 虚线带，显示定性离子丰度的上限和下限
11 删除**批处理表**中的**积分器**和**积分器参数**列的缺省值。	**a** 单击**恢复缺省布局**按钮。 **b** 右键单击**批处理表**的**甲基苯丙胺方法**部分，然后单击**添加 / 删除列**。 **c** 从右侧的列表中选择**积分器**和**积分器参数**（化合物方法）。 **d** 单击**删除**，然后单击**确定**。	

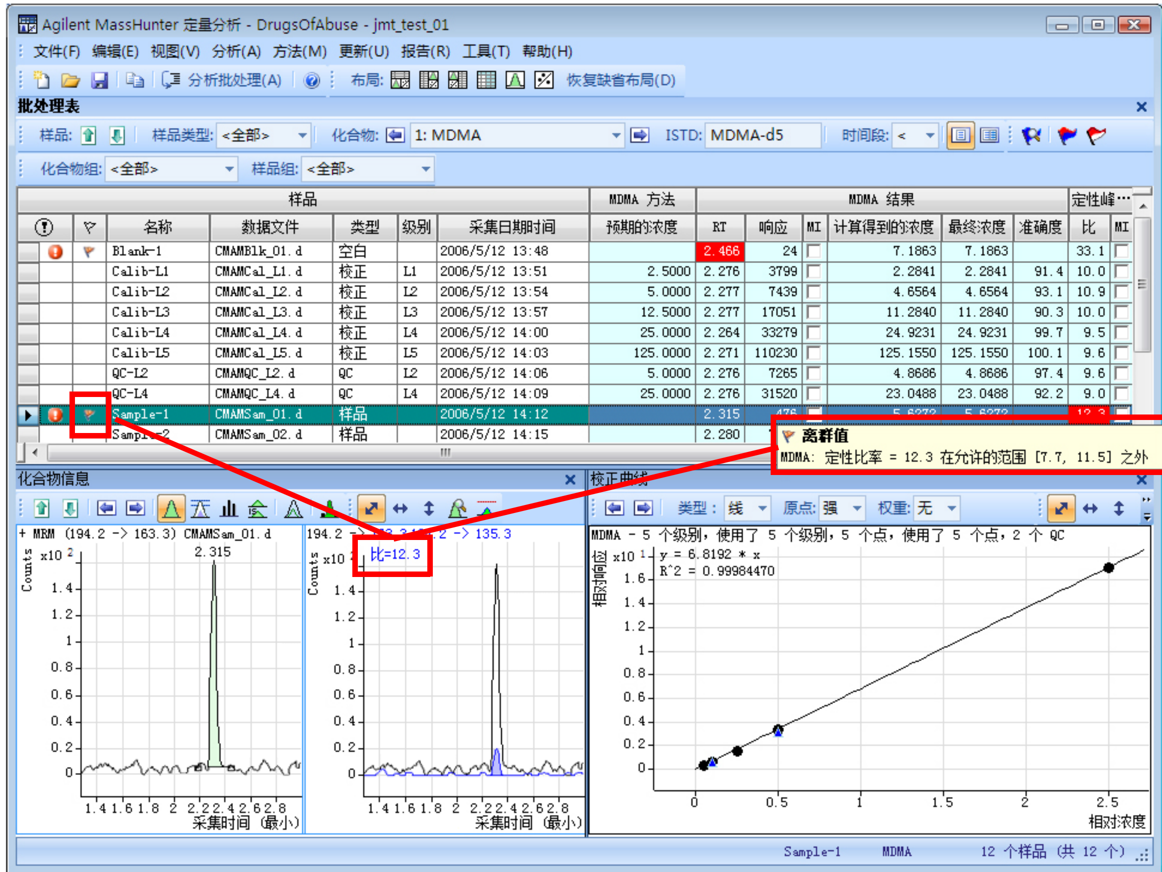
任务 3. 检测离群值

此任务说明如何精确调谐化合物的准确度范围，以及隐藏和显示具有离群值标记的结果。

步骤	详细说明	注释
1 查看 MDMA 的离群值信息。	**a** 单击批处理表工具栏中的下一个化合物图标 ，直到系统显示化合物 MDMA。 **b** 选择 **Blank-1** 行，将光标指向 **RT** 列，如下面的示例中所示。	



步骤	详细说明	注释
	c 检查“样品 1”的**定性离子 ... 结果 > 比列**中的离群值信息，如下面的示例中所示。	



步骤	详细说明	注释
2 更改方法中安非他明的准确度范围，然后重新分析批处理。 • 将准确度最大百分比偏差 (**Accuracy Max % Dev**)：设置为 **5%**。	**a** 单击工具栏中的**上一个化合物**图标 ，直到系统显示化合物**安非他明**。 **b** 选择表中的 **Calib-L5** 行。 **c** 单击**方法 > 编辑**切换到方法编辑模式。 **d** 单击**方法任务 > 离群值设置任务 > 准确度**。 **e** 将**安非他明**的**准确度最大百分比偏差值**设置为 **5%**。	您可以拆分**方法表**，方法是将小矩形拖至滚动条的左侧。在下面的示例中，使用底部滚动条旁边的矩形拆分**方法表**。两个部分中的信息完全相同。您可以使用这两个窗格同时查看表的两个部分。

可使用两个不同的滚动条分别移动两个部分。

步骤	详细说明	注释
	f 单击**方法任务 > 保存 / 退出 > 退出**，然后在显示确认提示时单击**是**，以退出方法并将方法应用于批处理。 **g** 按 F5 分析批处理。 红色（高）和蓝色（低）离群值现在显示在安非他明的**准确度**列中。	您也可以将**批处理表**拆分为两个部分。缺省情况下，**样品**列是锁定的，只能滚动其他列。如果将表拆分为两个部分，则可确定在每个部分中显示的列。如果要拆分**批处理表**，则需要清除“批处理表”快捷菜单中的**锁定样品列**菜单项。

Agilent MassHunter 定量分析 - DrugsOfAbuse ...
文件(F) 编辑(E) 视图(V) 分析(A) 方法(M) 更新(U) 报告(R)
工具(T) 帮助(H)
布局:
批处理表
样品: 样品类型: < 化合物:
化合物组: <全部> 样品组: <全部>

		名称	数据文件	浓度	准确度	比
!		Blank-1	CMAMBlk_01.d			
	▽	Calib-L1	CMAMCal_L1.d	2892	131.6	24.3
	▽	Calib-L2	CMAMCal_L2.d	7070	114.1	33.5
	▽	Calib-L3	CMAMCal_L3.d	5610	108.5	26.6
	▽	Calib-L4	CMAMCal_L4.d	5517	106.2	29.0
		Calib-L5	CMAMCal_L5.d	5395	99.6	27.0
		QC-L2	CMAMQC_L2.d	1873	103.7	27.6
	▽	QC-L4	CMAMQC_L4.d	6514	110.6	25.6
!		Sample-1	CMAMSam_01.d			
		Sample-2	CMAMSam_02.d	8422		31.0
		Sample-3	CMAMSam_03.d	1047		25.3
!		Sample-added	CMAMSam_added.			

步骤	详细说明	注释
3 使用下列一组离群值标记图标： • 检查具有高离群值的样品 • 检查同时具有高离群值和低离群值的样品 • 再次显示所有样品。 • 隐藏安非他明的**准确度**和**保留时间**的离群值标记 • 再次显示这些离群值标记	**a** 单击工具栏中的**显示具有高离群值的样品**图标，以仅显示具有高离群值的样品。 **b** 单击工具栏中的**显示具有高 / 低离群值的样品**图标，以仅显示具有低离群值的样品。 **c** 再次单击**显示具有高 / 低离群值的样品**图标，以显示所有样品。 **d** 单击**选择离群值**图标，以显示**离群值**对话框。 **e** 清除**准确度**和**保留时间**复选框，然后单击**确定**。 **f** 单击**选择离群值**图标，以显示**离群值**对话框。 **g** 选中**准确度**和**保留时间**复选框，然后单击**确定**。	• 请注意，要恢复**批处理表**以查看具有和不具有离群值的所有数据文件，只需再次单击选定用于进行离群值过滤的图标。

练习 5
生成定量报告

此练习将帮助您学习如何执行下列任务：

- 使用单个模板生成报告
- 预览报告

在本练习中将使用 **DrugsOfAbuse** 批处理。可使用三重四极杆数据文件、Q-TOF 数据文件和 TOF 数据文件执行相同的任务。

我们将每一个练习的内容都放在了一个表中，每个表中分别包含以下三列：

- 步骤 – 通过这些常规说明自学使用此程序。
- 详细说明 – 如果您需要帮助或更喜欢使用步进学习方式，则可使用这些说明。
- 注释 – 阅读这些注释可了解有关练习中的每个步骤的提示和其他信息。

报告设计器中的 " 高级 " 选项卡提供更多用于自定义报告的选项。有关 " 高级 " 选项的详细信息，请参见*联机帮助*。

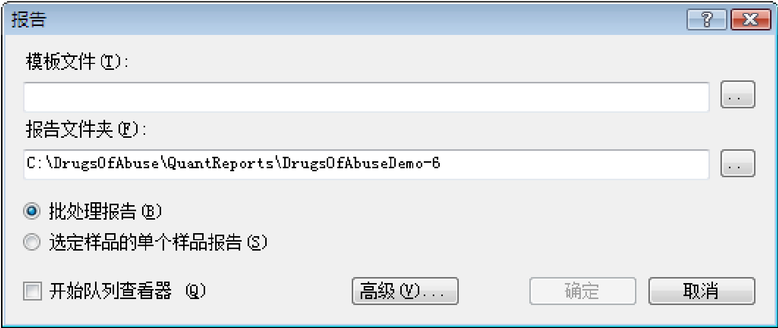
有两个主要标准可确定如何在 MassHunter 中创建报告，它们是：

- 您选择的**报告模板**。（有超过 50 个预定义的 Excel 模板可供使用。有关完整的列表，请参见*联机帮助*。）
- 您选择的**报告模式**。（批处理与样品）
  - **批处理**报告模式将为整个报告创建一个 Excel 文件。
  - **样品**报告模式将为指定的每个样品创建一个 Excel 文件。

在此任务中，首先使用一个 Excel 模板生成单个样品报告，然后使用相同的模板生成完整的批处理报告。

步骤	详细说明	注释
1 如果需要，打开批处理文件 ***iii*_Test_01.batch.xml**。 如果批处理已打开，则跳至步骤 2。	**a** 要启动定量分析程序，请单击桌面上的**定量分析 (QQQ)** 图标。 **b** 单击工具栏中的**打开批处理** 以显示**打开批处理**对话框。 **c** 浏览至 \ ***您的目录*** **\DrugsOfAbuse** 并单击 ***iii*_Test_01.batch.xml**。	• 也可以通过单击 " 开始 " 菜单中的**程序 > Agilent > MassHunter 工作站 > 定量分析 (QQQ)** 来访问该程序。 • 如果未显示缺省布局，请单击工具栏中的**恢复缺省布局**，然后再打开批处理。 恢复缺省布局(D)
2 首先为**样品 1** 生成单个样品报告。高亮显示批处理表中的**样品 1**。	如果要为多个样品生成报告，可以使用 Shift 和 Ctrl 键从批处理表中选择多个样品。	• 将为批处理表中高亮显示的每个样品分别生成一个单独的样品报告。在此任务中，我们仅选择了一个样品，因此只会生成一个样品报告。

步骤	详细说明	注释
3 选择报告模板。 • 添加模板 **Quantreport_ISTD_ByCompound _B_04_02.xlt**。	**a** 单击工具栏中的**报告 > 生成**。 系统将显示**报告**对话框。 **b** 单击**模板文件**字段旁边的**浏览**按钮 ... 以显示**打开**对话框。 **c** 浏览至 **Letter\ISTD\ByGroup** 目录，然后选择 **Quantrport_ISTD_ByCompound_ B_04_02.xlt** 并单击**打开**。 程序将该模板添加到**报告**窗格的**模板文件**字段中。	• 请注意， **B_04_02** 指定对应于定量分析软件版本，该版本将随着时间而变化。因此，缺省报告文件名也应相应地进行更改。
4 接受该报告的缺省目标目录。	您可以在**报告文件夹**文本框中更改用于保存 Excel 报告的目标目录，例如 \ ***您的目录*** **\DrugsOfAbuse\ QuantReports*iii*_Test_03**。但在这里，可接受缺省值。	• 可使用**报告文件夹**字段指定要存储报告的文件夹。缺省情况下，软件使用带有破折号和编号的子目录，其名称与位于您的批处理目录的 **QuantReports** 子目录中的批处理的名称相同。选择**报告文件夹**字段旁边的**浏览**按钮以浏览至其他目录。将根据数据文件自动命名该报告，其扩展名按数字顺序编号。

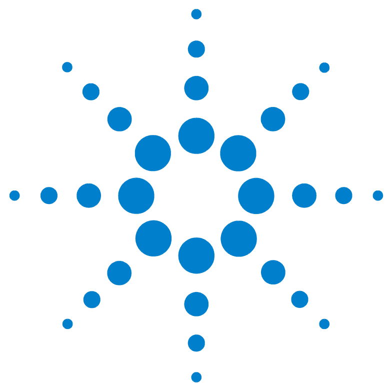


步骤	详细说明	注释
5 选择**选定样品的单个样品报告**单选按钮。	该选项将为每个选定的样品 （在这里是**样品 1**）分别生成一个单独的**样品报告**。	• 将根据每个 Excel 模板生成单个样品报告。在这里，我们使用了一个模板，因此将创建一个样品报告 （一个 Excel 文件）。
6 选择**输出** （可选）	使用该选项可以将报告作为 PDF 查看并打印报告。	
7 单击**确定**生成报告。 • 在**任务队列查看器**中查看报告生成的状态。	**a** 如果要查看报告生成的进度，请选中**启动队列查看器**复选框。 **b** 单击**报告**对话框中的**确定**，以生成报告。 **c** 在**状态**列中查看报告的进度。 报告完成后将显示提示，并且状态列将指示报告已完成。	• 所有生成的报告都将显示在查看器中。最新的报告将显示在列表顶部。



8 要查看或打印此报告，请在 Excel 中打开它。	**a** 高亮显示您要查看的报告。 **b** 从**任务队列查看器**对话框的工具栏中选择**操作**。将显示一个下拉菜单，其中包含最新生成的报告。 **c** 双击报告文件以打开 Excel 电子表格。	• 可在 Excel 中查看或打印报告。 • 或者，可通过在 Windows 资源管理器中选择文件来打开电子表格。

步骤	详细说明	注释
9 现在使用此相同的模板生成批处理报告。返回到批处理表（如步骤 1 中所述）。	退出 Excel 电子表格并返回到 ***iii_Test_01.batch.xml***。	
10 根据上述过程重复步骤 3 和 4。		
11 选择**批处理报告**单选按钮。	这将生成单个批处理报告 （单个 Excel 文件），其中包含*所选批处理中的所有内容*。	
12 重复步骤 6 和 7 以生成并查看此报告。		



参考

十大主要功能 90
定量方法 94
无参数积分器 95
批处理概览：结果 97
化合物概览 98
化合物确认 100
化合物校准 101

十大主要功能

定量分析程序包含十大功能，可帮助您更轻松有效地对数据进行积分、定量和检查：

批处理概览：批处理表设置

- 新建批处理 — 创建批处理表，您可以在该表中从单个视图对样品和化合物进行操作
- 分析 — 使用当前打开的方法重新创建校准曲线以及重新定量所有样品
- 定量 — 将现有的校准曲线应用于当前批处理、样品或化合物

  应用定量的粒度可帮助您对特定信号进行快速操作。
- 积分 — 将信号积分到当前批处理、样品或化合物中

方法编辑器

- MRM 设置 — 以简单的分步方式演示定量方法
- 根据采集的 MRM 数据创建方法 — 在只需要指定 ISTD 关系和浓度后，根据采集方法自动创建定量方法
- 使用 " 样品信息 " 窗口中的图形手动创建方法
- 按时间段分组 — 以时间段顺序按化合物组织方法
- 验证 — 确保定量方法符合严格标准
- 同位素稀释 — 支持根据 (Rx, Ry) Colby 常数计算进行调整

校准

- 曲线拟合助手 — 计算曲线的所有组合；选取禁用点；使用可按置信带排序以及可按 R^2、标准差和最大百分比残差进行自定义过滤的方程显示结果
- 稀释助手 — 根据缺省值或指定的系列稀释方案计算和创建校准级别

- 复制校准级别 – 将校准级别从一个化合物复制到其他化合物
- 禁用校准点 – 根据级别、表中的单个化合物或在图形中以交互方式禁用校准点
- 曲线拟合 – 按下列对象支持曲线：
    - 类型：线性、二次、一阶 ln、二阶 ln、响应因子平均值
    - 原点：忽略、包含、强制、空白偏移
    - 权重：无、 1/x、 $1/x^2$、 1/y、 $1/y^2$、对数、 $1/SD^2$
- 替换曲线 – 根据现有的校准样品创建校准曲线
- 平均重复数 – 按化合物数将新的重复数平均到现有的校准曲线中
- 导入级别 – 从文件导入校准级别和浓度
- 缩放图形 – 使图形能够按 X、Y、X-log 和 Y-log 进行自动缩放；进行智能缩放以适合指定的级别

积分器

- Agile 积分器 – 对所有级别的信号提供无参数积分器，可减少手动积分工作量
- 积分器规格 – 生成规格，使信号的积分可接受、检查或拒绝积分
- 信噪比 – 计算峰的信噪比
- 图形 – 显示与化合物的绘图和峰信息的显示的高级交互情况

批处理概览：结果

- 导航 – 在样品、化合物、时间段和化合物组之间移动（上一个、下一个、直接）
- 化合物视图 – 在当前化合物 / 样品的详细信息或多个化合物 / 样品的摘要信息之间切换
- 批处理表视图 – 支持平面表布局，或以垂直或水平方式钻取嵌套表以了解详细信息和化合物表布局
- 窗口布局 – 将屏幕重新组织为缺省设置，或保存或调用自定义窗口布局

- 浮动窗格 — 使任何窗格浮动到另一个监视窗上面，以便进行双监视窗演示
- 导出表 — 将批处理概览表直接导出到 Excel 文件
- 导出图形 — 以多种格式将任何图形导出为自定义大小
- 复制 / 粘贴 — 将任何图形直接复制或粘贴到 Microsoft Office 应用程序中，如 Word、 PowerPoint、 Excel 等
- 打印 / 预览 — 以 WYSIWYG 格式 （所见即所得）打印或预览屏幕内容
- 自动检查 — 以自动和交互方式显示每个样品，允许您随时停止以进一步检查
- 过滤器 — 显示样品类型的任意组合
- 排序 — 对表中显示的任何列进行排序
- 列 — 允许添加、删除、重新排序、保存、调用、恢复或重置列

化合物概览：结果

- 打印 / 预览 — 打印或预览化合物色谱图。
- 复制 / 复制页面 — 将屏幕上选定的化合物色谱图或所有化合物色谱图复制到 Microsoft Office 应用程序中，如 Word、 PowerPoint、 Excel 等。
- 编辑化合物色谱图 — 手动积分数据或选择零峰值化合物。
- 视图 — 显示色谱图详细信息，如基线、填充的峰。
- 调整轴 — 链接 / 取消链接 X 轴或 Y 轴，自动调整以适合窗格、适合峰或适合校准级别。
- 布局 — 按化合物或样品组织行，选择色谱图叠加，逐一查看样品或化合物，设置显示选项。
- 高亮显示 — 具有离群值的化合物

离群值检测

- 管理 — 设置和选择可被检测并单独控制的特定离群值

- 高亮显示 – 高亮显示结果表中的离群值 （高显示为红色，低显示为蓝色）
- 过滤器 – 允许显示选定的过滤器类型
- 离群值 – 支持对特定的数据类型进行离群值检测
- 定量消息 – 对在定量过程中发生严重问题的样品发出警告

报告

- 生成 – 生成图形和报告结果，以便导入和设置为 Excel XML 格式
- 自定义 – 可让您自定义 Excel 模板

更新

- 更新 / 计算保留时间平均值 – 更新化合物的保留时间或计算其平均值
- 更新定性离子比 – 根据化合物的当前样品更新定性离子比
- 更新质量指定 – 根据化合物的当前样品更新质量指定

定性

- 样品信息 – 允许显示当前样品的色谱图和提取质谱图
- 色谱图 / 质谱图 – 提供可用于探测不同类型的信号的质谱图的重要功能

定量方法

可使用方法编辑器从 MRM 采集数据文件（图 13）、 SIM 数据、采集的扫描数据文件或以手动方式创建新定量方法。

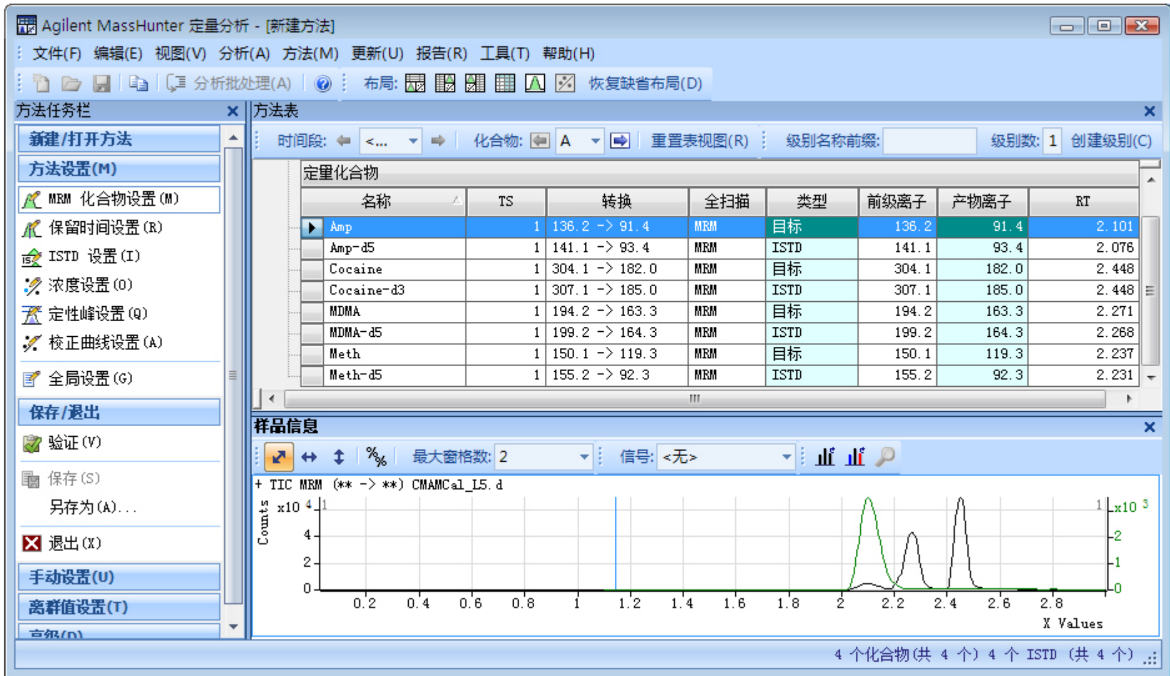


图 13 定量视图 – 方法编辑器

将从批处理表选定的文件用作开发方法设置的参考。然后，使用这些设置生成校准曲线并定量标准、 QC 和样品。

无参数积分器

什么是无参数积分器？

Agilent 开发了特别适用于 MS/MS 数据的新的峰积分器算法。无参数积分器具有下列优点：

- 通过以统计方式设置峰的起点和终点，处理低级噪音数据
- 自动调整阈值
- 不需要对低级 MRM 信号的峰重新进行手动积分
- 识别可靠的峰和应丢弃的峰

积分结果示例

图 14 显示两个极端条件下的数据。

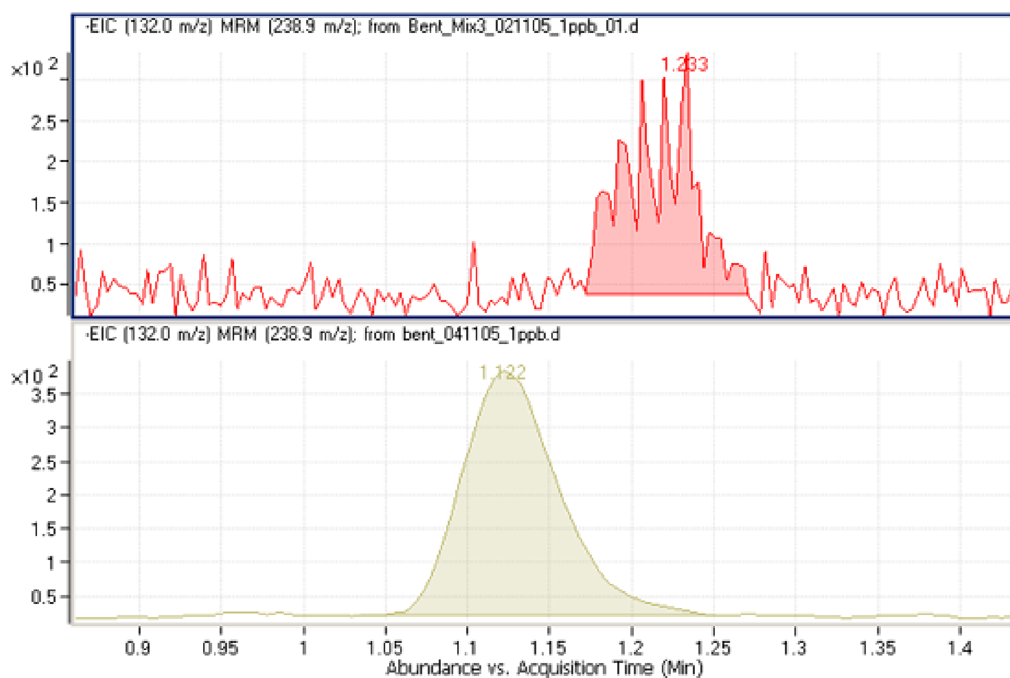


图 14 无参数积分器 – 两个极端条件下的数据

下方的色谱峰很容易积分，因为它是一个完美的高斯形状的峰，但很难定义上方峰的基线。实际上，许多积分器算法会将这些结果解释为多个峰。

然而，Agilent 的新算法可以顺利地定义基线并将其识别为单个峰。实际上，即使基线处于上升而不是平面状态 （如图所示），这种新的积分器算法也会将其作为单个峰积分。

批处理概览：结果

从安非他明 (Amp) 的分析获得的积分结果显示在图 15 中。这是**批处理表**、**化合物信息**和**校准曲线**的平面视图。

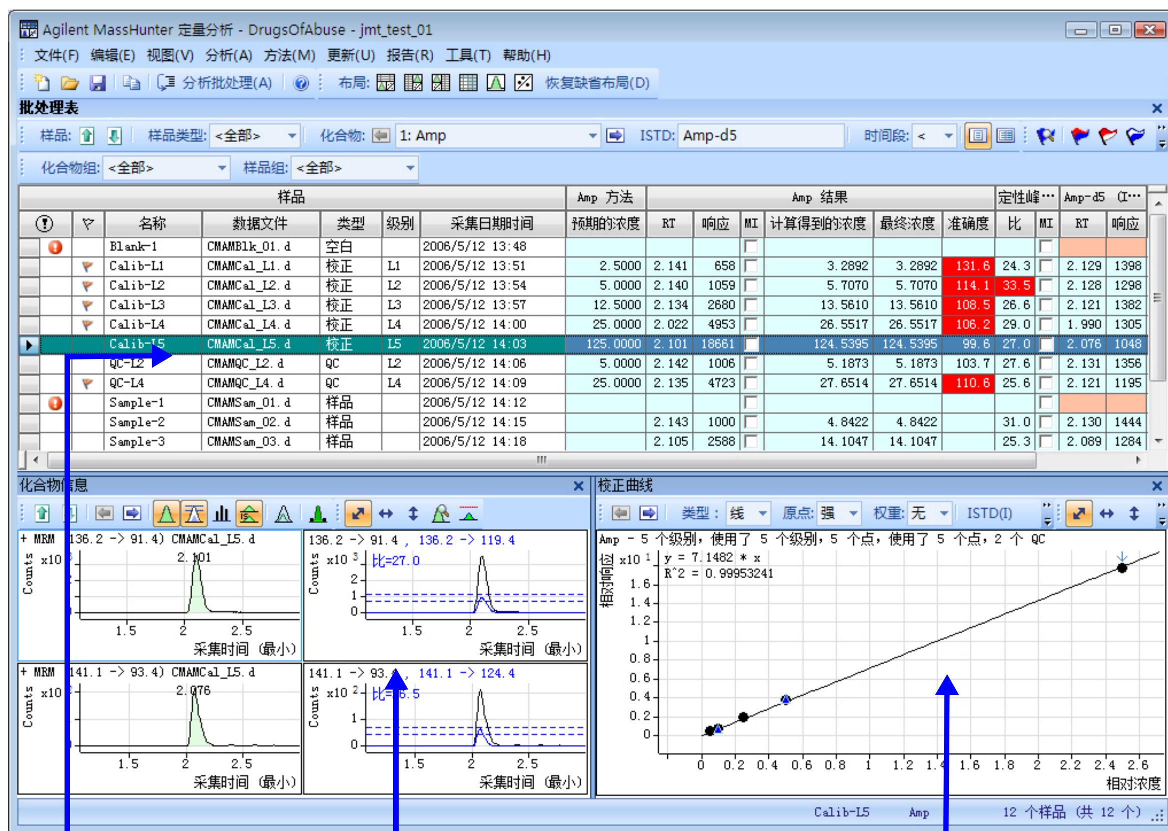


图 15 安非他明结果

- **批处理表**显示将定量方法应用于每个数据文件所得到的积分结果。带颜色的高亮显示的数据对应于低于 （蓝色） 或高于 （红色） 预期结果的结果。
- 在左下方的**化合物信息**窗口显示积分的色谱峰。
- **校准曲线**显示在右下方。

化合物概览

化合物概览视图会显示在每个样品中检测到的特定化合物，如图 16 中所示。使用此功能可以查看化合物色谱图，并对其进行排列以便进行数据分析。对于在多批样品中寻找化合物趋势的食品安全实验室而言，它特别有用。

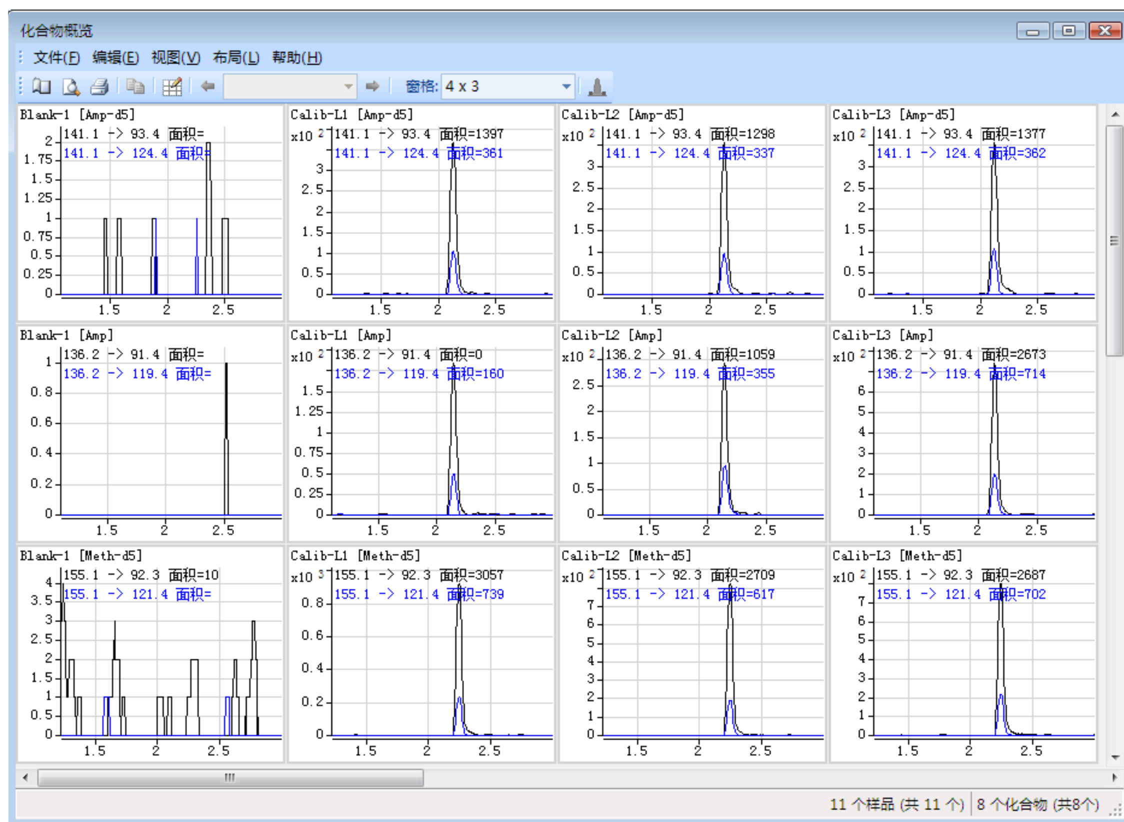


图 16 定量分析中的化合物概览

可使用化合物概览中的设置功能选择要包括在视图中的化合物和样品。如图 17 所示，**设置图形**框顶部的不同选项卡提供用于选择和排列色谱图的各种选项。

- **样品**选项卡列出批处理中包括的所有样品，并提供用于选择所有样品或特定样品的选项。
- **化合物**选项卡列出在批处理中检测到的化合物。它允许您选择要查看的化合物。

- 使用**组织**选项卡可以根据样品和化合物指定色谱图的排列方式。它为化合物、样品和离群值提供了叠加选项。该选项卡提供用于调整色谱图的选项，如显示基线，或填充峰以最有效地说明化合物检测趋势。
- **离群值**选项卡提供用于显示数据中的离群值的选项。

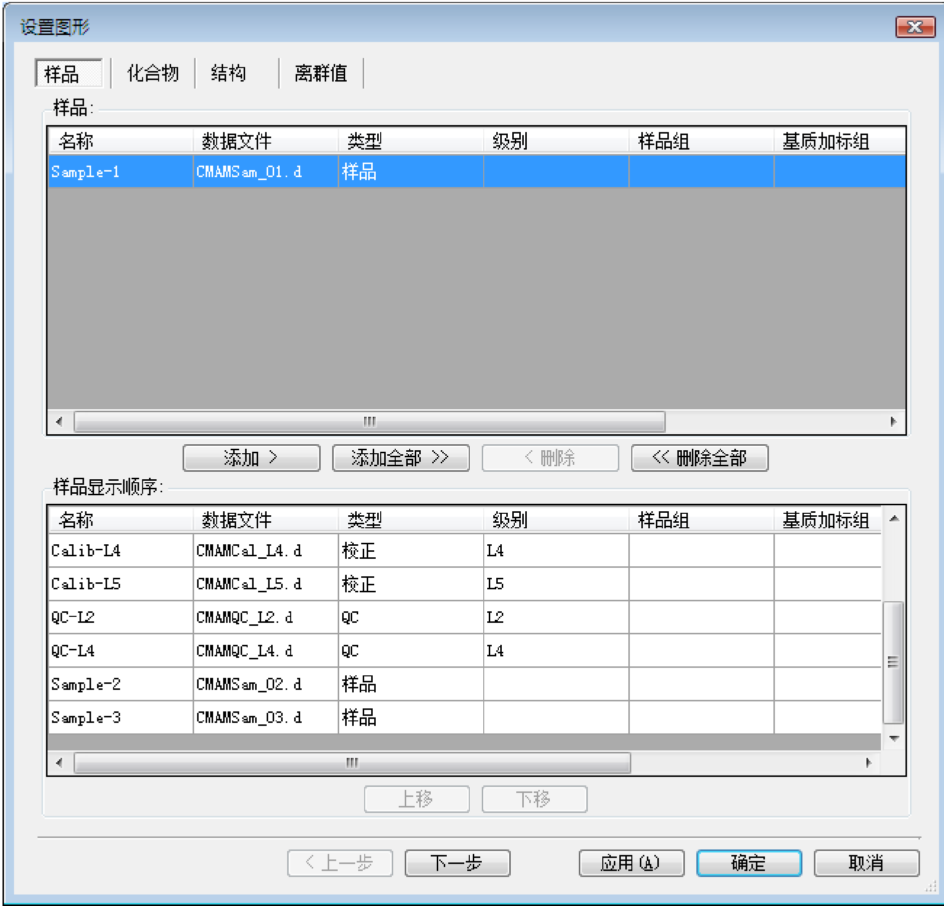


图 17 化合物概览的设置选项

化合物确认

图 18 中显示的格式是认证的药物测试实验室的值。它显示两组可从 THC 分析中获得的图谱。

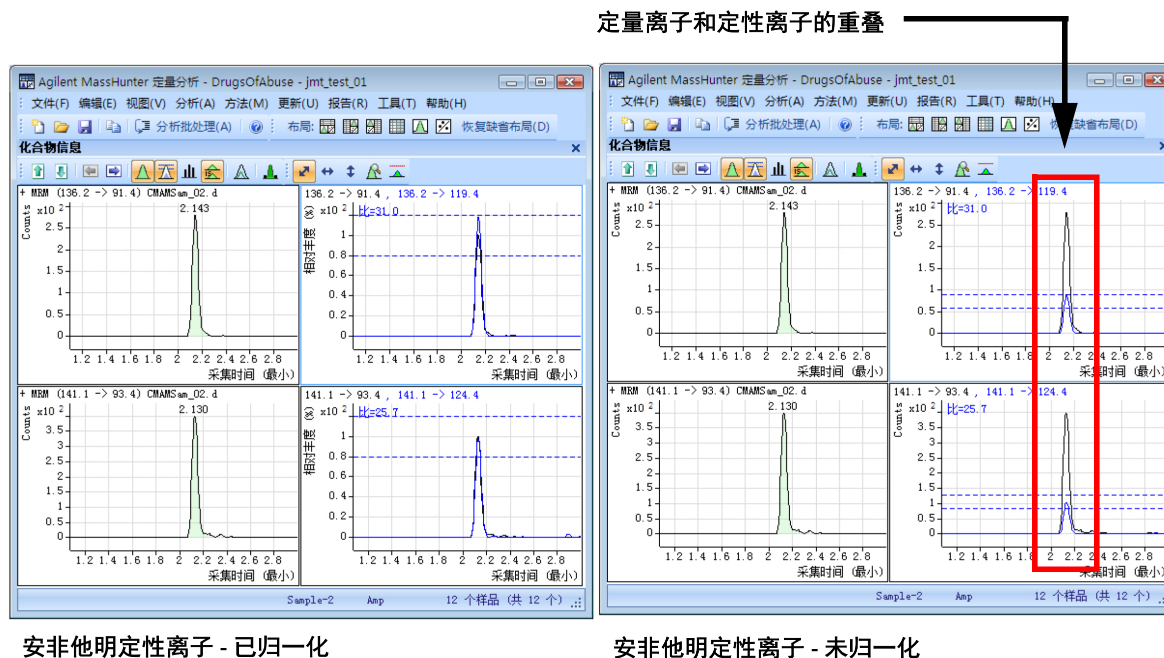


图 18 定量分析中的安非他明

必须采集两个产物离子才能进行确认：定量离子和定性离子。通常，用于定量的定量离子是两个产物离子中丰度最大的那个。

要能够确认安非他明的存在，定性离子峰面积必须至少为定量离子的一定百分比，可在定量方法中设置该数字。在本例中，将使用 26.5%，窗范围为 ± 20%。这表示对于分析物安非他明而言，定性离子的面积必须在 21.2% - 31.8% 范围内。ISTD 的定性离子或 Amp-d5 也必须在指定的范围内。

从左侧的图中很难确定定性离子是否在可接受窗范围内，因为定性峰的大小按因子 1/0.265 进行了归一化。在右侧的图中，在定量离子峰的 26.5% 处使接受窗居中，绘制的定性离子未归一化，或绘制在与定量离子相同的刻度上。如果离子不在所需的接受窗范围内，则它带有蓝色阴影，但它仍是透明的，不会隐藏定量离子。这样可以容易地从视觉上确认化合物的存在。

化合物校准

定量分析程序包含有助于校准和定量化合物的多种工具：

- 曲线拟合助手
- 光标指针可获得数据点信息
- 数据点缩放

曲线拟合助手

曲线拟合助手提供评估可能的曲线拟合的分析视图 （图 19）。

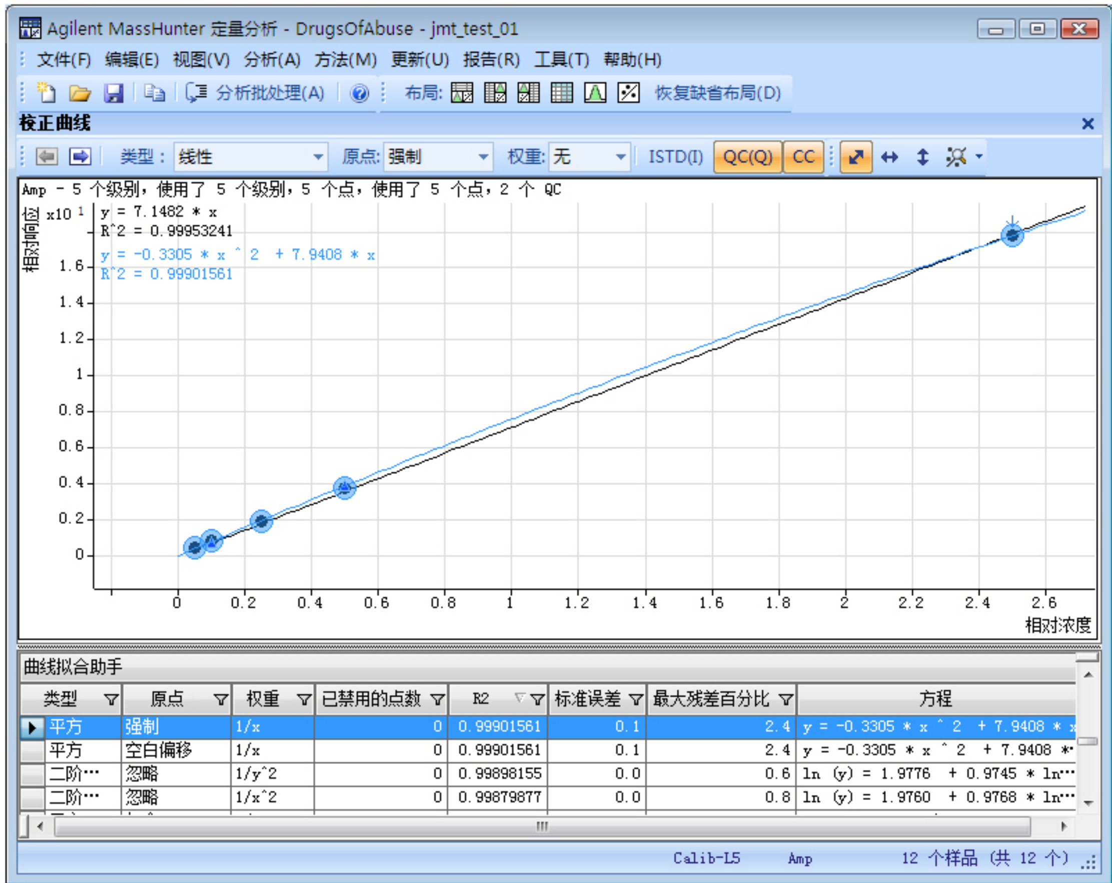


图 19 曲线拟合助手

请注意，所绘制的通过数据点的黑色线条使用 “ 二次 ” 作为 “ 拟合 ”，使用 1/x 作为 “ 权重 ”，使用 “ 包含 ” 作为 “ 原点 ”，如顶部所示。曲线设置的其他多种组合列在校准曲线下方，其中以蓝色高亮显示选定的曲线。高亮显示的设置在曲线窗口中也以蓝色绘制。

例如，您可以查找最佳曲线拟合，即对应于最高 R^2 值的曲线拟合，方法是按最佳到最差 R^2 值对所有可能的结果排序，然后确定将多少数据点看作离群值。

例如，列表中的第一组参数对应于线性拟合、忽略原点和相等权重。对应的 R^2 值是 0.9998001477，这个值非常好。只需在表中单击该条目即可绘制相应的曲线。

可使用这些设置重新定量数据。在某些实验室中，排除离群值是一个常见的标准操作程序 (SOP)。

数据点信息

在校准曲线中，重叠的数据点并不常见，特别是在三重四极杆 MS 数据中，其中 %RSD 值非常低（图 20）。要区分数据点，可将光标移至数据点上方，以获得有关这些数据点的更多信息。

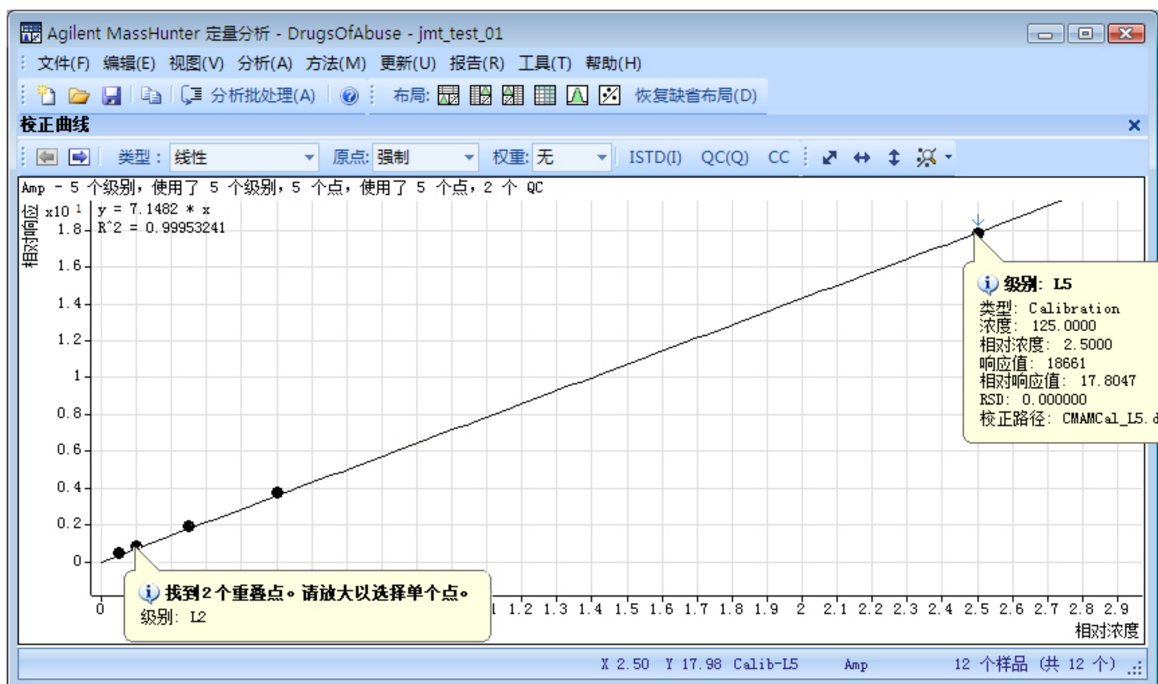


图 20 安非他明结果：校准数据点信息

该图显示此类型的信息的两个示例。第一个示例显示数据点重叠，并建议您放大以单独查看它们。第二个示例显示有关数据点本身的信息。

数据点缩放

您可以在重叠的数据点上放大，以查看视觉上无法看清的数据点。

www.agilent.com

内容提要

入门指南包含可帮助您使用定量分析程序的练习。在本指南中，您将学习：

- 如何设置和定量一批 Agilent 三重四极杆 LC/MS 和 GC/MS 数据文件
- 如何设置和定量一批 Agilent Q-TOF LC/MS 数据文件
- 如何检查定量结果并发现不规则情况
- 如何提高结果准确度
- 如何生成和检查定量报告

第一版， 2011 年 6 月
G3335-97108



Agilent Technologies